

TRABAJO DE FIN DE GRADO
Grado en Ingeniería Química
Escola Técnica Superior de Enxeñaría
Universidade de Santiago de Compostela



Escola
Técnica
Superior
de Enxeñaría

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÓXIDO DE PROPILENO A PARTIR DE PERÓXIDO DE HIDRÓGENO

Ángeles Antonieta Rodríguez Oreiro
Sabela Teixeira Taboada

Julio de 2020

ÍNDICE GENERAL

Documento I. Memoria

Anexo I. Balances de materia y energía

Anexo II. Cálculos justificativos

Anexo III. Análisis de viabilidad económica

Anexo IV. Fichas de seguridad

Documento II. Planos

Documento III. Estudios con entidad propia

Documento IV Pliego de condiciones

Documento V. Presupuesto

Anexo. Dimensionamiento básico de otros equipos

DOCUMENTO I

Memoria

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	6
1.1. Objeto	6
1.2. Justificación	6
2. MATERIAS PRIMAS	7
2.1. Propileno.....	7
2.1.1. Propiedades	7
2.1.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad y seguridad	8
2.2. Peróxido de hidrógeno	9
2.2.1. Propiedades	9
2.2.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad y seguridad	10
3. PRODUCTO: ÓXIDO DE PROPILENO	11
3.1. Contexto histórico.....	11
3.2. Propiedades físicas y termodinámicas	12
3.3. Propiedades químicas	13
3.4. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad y seguridad	13
4. ANÁLISIS DE MERCADO	14
4.1. Panorama global	14
4.2. Mercado de productos derivados del óxido de propileno	16
4.3. Mercado del óxido de propileno	18
4.4. Evolución de precios, exportaciones e importaciones	18
4.5. Justificación de la capacidad de producción.....	21
4.6. Mercado de materiales de partida	21
4.7. Síntesis.....	24
4.8. Situación derivada de la crisis del COVID-19.....	24
5. ESTUDIO DE ALTERNATIVAS	25
5.1. Primera generación	26
5.1.1. Proceso clorhidrina (CHPO).....	26

5.2.	Segunda generación	28
5.3.	Tercera generación.....	30
5.3.1.	Proceso a partir de hidroperóxido de cumeno (POC).....	30
5.3.2.	Proceso a partir de peróxido de hidrógeno (HPPO)	32
5.4.	Otros procesos en desarrollo.....	34
5.4.1.	Proceso de HPPO mejorado	34
5.4.2.	Proceso por oxidación directa	34
5.5.	Alternativa seleccionada	35
5.6.	Selección del disolvente.....	38
5.7.	Selección del catalizador	38
5.8.	Licenciarios de tecnologías del proceso HPPO	38
6.	LOCALIZACIÓN	40
6.1.	Suministro de materiales de partida.....	42
6.2.	Proximidad a mercados de consumo.....	42
6.3.	Medios de transporte y comunicación	43
6.4.	Disponibilidad de mano de obra	44
6.5.	Características del polígono industrial seleccionado	44
6.5.1.	Superficie disponible e infraestructura	44
6.5.2.	Servicios	46
6.5.3.	Climatología	46
6.5.4.	Sismicidad	48
6.6.	Impacto ambiental.....	48
6.7.	Consideraciones políticas y estratégicas	49
7.	ESTUDIO DE VIABILIDAD TÉCNICA.....	49
7.1.	Viabilidad tecnológica	49
7.2.	Recursos disponibles.....	50
7.2.1.	Equipos.....	50
7.2.2.	Utilidades.....	50
7.2.3.	Materiales de partida y producto	50

7.2.4.	Acceso a las zonas de producción	51
7.2.5.	Mano de obra.....	51
7.3.	Factores externos	51
7.4.	Seguridad del proceso	52
7.5.	Ámbito económico.....	52
8.	DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	53
8.1.1.	Metanol.....	53
8.1.2.	Agua	54
8.1.3.	Oxígeno	55
8.1.4.	Propilenglicol (PG).....	56
8.1.5.	Metoxipropanol	57
8.1.6.	Servicios auxiliares/Utilidades	58
8.2.	Secciones del proceso	58
8.2.1.	Sección 100: Acondicionamiento de materias primas y reacción.....	59
8.2.2.	Sección 200: Separación y recirculación de propileno	60
8.2.3.	Sección 300: Purificación de PO y recirculación de metanol.....	61
9.	DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS	61
9.1.	Lista de equipos	61
9.2.	Equipos en sección 100.....	62
9.2.1.	Bomba P-101 A/B	62
9.2.2.	Intercambiador de calor E-101	62
9.2.3.	Reactor R-101.....	62
9.2.4.	Válvula VLV-101	63
9.3.	Equipos en sección 200.....	63
9.3.1.	Flash V-201	63
9.3.2.	Compresor C-201	63
9.3.3.	Intercambiador de calor E-201	63
9.3.4.	Flash V-202	63
9.3.5.	Bomba P-201 A/B	63

9.4.	Equipos en sección 300.....	64
9.4.1.	Columna de destilación T-301.....	64
9.4.2.	Columna de destilación T-302.....	64
9.4.3.	Compresor C-301	64
9.4.4.	Columna de destilación T-303.....	64
9.4.5.	Intercambiador de calor E-307	64
9.4.6.	Válvula VLV-301	64
9.4.7.	Intercambiador de calor E-308	65
9.4.8.	Válvula VLV-302.....	65
9.4.9.	Columna de destilación T-304.....	65
9.4.10.	Bomba P-305 A/B	65
10.	CONTROL E INSTRUMENTACIÓN	65
10.1.	Introducción.....	65
10.2.	Nomenclatura.....	68
10.3.	Lazos de control en sección 100	70
10.4.	Lazos de control en sección 200	71
10.5.	Lazos de control en sección 300	74
10.6.	Alarmas.....	80
10.7.	Válvulas de alivio	80
11.	SEGURIDAD	81
11.1.	Introducción.....	81
11.2.	Ámbito jurídico.....	81
11.3.	Inventario de sustancias	82
11.4.	Clasificación de la instalación según Directiva Seveso	84
11.5.	Estudio de reactividad química descontrolada.....	86
11.5.1.	Clasificación NFPA	86
11.5.2.	Matriz de compatibilidad química.....	87
11.6.	Distancias de seguridad	88
11.7.	Índice DOW de fuego y explosión.....	90

11.7.1.	Unidades pertinentes en el proceso	91
11.7.2.	Factor de material (FM)	91
11.7.3.	Riesgos generales del proceso.....	92
11.7.4.	Riesgos especiales del proceso.....	92
11.7.5.	Hojas de cálculo	93
11.7.6.	Grado de peligro.....	95
11.7.7.	Radio y área de exposición	95
11.7.8.	Factor de daño.....	95
11.8.	Diseño de las válvulas de alivio.....	96
12.	LEGISLACIÓN, NORMAS, REFERENCIAS Y CÓDIGOS DE DISEÑO	97
12.1.	Legislación general	97
12.1.1.	Ámbito comunitario	97
12.1.2.	Ámbito nacional	97
12.2.	Legislación sobre seguridad.....	97
12.2.1.	Ámbito comunitario	97
12.2.2.	Ámbito nacional	98
12.3.	Legislación sobre medioambiente.....	98
12.3.1.	Ámbito comunitario	98
12.3.2.	Ámbito nacional	99
12.3.3.	Ámbito autonómico.....	99
12.4.	Normas, guías y códigos de diseño.....	99
13.	BIBLIOGRAFÍA	100

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Objeto

El presente proyecto tiene como objeto el diseño de una planta de producción de óxido de propileno a partir de peróxido de hidrógeno empleando la tecnología Evonik-Uhde HPPO (*Hydrogen Peroxide to Propylene Oxide*) recientemente desarrollada en conjunto por Evonik y ThyssenKrupp. La planta de producción alcanzará una capacidad de producción anual de 150 kton de óxido de propileno al 99,97% de pureza.

Se trata de un proceso en el que el peróxido actúa como agente oxidante para la oxidación directa de propileno a óxido de propileno en presencia de una disolución metanol/agua. Para ello se emplea un catalizador de especial calidad de silicalita de titanio (TS-1) con el que se obtiene una elevada conversión del peróxido de hidrógeno y alta selectividad a óxido de propileno. Dicha reacción tendrá lugar en el reactor catalítico heterogéneo R-101, diseñado de manera rigurosa por Sabela Teixeira Taboada.

A la salida del reactor se emplea una secuencia de columnas de destilación con el fin del reaprovechar los reactivos no consumidos y alcanzar la pureza deseada del óxido de propileno. Asimismo, en la última torre de destilación (T-304) se llevará a cabo la separación del metanol que actuó como disolvente en la reacción para así poder recircularlo al inicio del proceso, dicho equipo será diseñado rigurosamente por Ángeles Antonieta Rodríguez Oreiro.

Este proyecto constituirá el Trabajo Fin de Grado con el que las alumnas Ángeles Antonieta Rodríguez Oreiro y Sabela Teixeira Taboada optan al Grado en Ingeniería Química otorgado por la Escola Técnica Superior de Enxeñaría de la Universidade de Santiago de Compostela.

1.2. Justificación

Se ha decidido llevar a cabo el diseño de una planta de producción de óxido de propileno, pues se trata de uno de los productos químicos intermedios de mayor valor industrial, teniendo una demanda mundialmente creciente en los últimos años gracias especialmente a los avances en el sector de la construcción. De esta manera, se determinó que representa una alternativa interesante que será útil por un largo periodo de tiempo de acuerdo con las necesidades del mercado actual y futuro.

La elección de la tecnología HPPO fue basada en el hecho de ser un proceso innovador con características medioambientales óptimas. Entre las ventajas principales de esta tecnología destacan las plasmadas a continuación:

- Solución a la problemática de los métodos de producción de PO (óxido de propileno) convencionales.

- Libre de coproductos.
- Consumo eficiente de materiales de partida
- Catalizador de alto desempeño con una larga vida útil.

Asimismo, se trata de un proceso con relativa sencillez para el desarrollo del presente proyecto, pues integra elementos característicos de la ingeniería química estudiados a lo largo del grado: un reactor catalítico, columnas de destilación, recirculaciones... Así, permitirá la aplicación y el desarrollo de los conocimientos adquiridos.

Por todo lo anterior y considerando un mundo donde las restricciones por motivos medioambientales son cada vez más estrictas y en el que crece la demanda de tecnologías sostenibles, el proceso HPPO puede considerarse como un proceso de gran interés para la realización de este proyecto y por ello es el seleccionado.

2. MATERIAS PRIMAS

2.1. Propileno

El propileno, denominado propeno por la IUPAC, fue la primera materia prima petroquímica empleada a escala industrial, para la producción de isopropanol. El propeno es uno de los *building blocks* más relevantes de la industria petroquímica. Ha sido un agente importante en la mejora del octanaje en el mercado de la gasolina por muchos años.

Durante un tiempo, el propeno fue opacado por otra olefina, el etileno. Sin embargo, el importante desarrollo y expansión de este producto químico a partir de 1965 es, en gran parte, consecuencia del éxito del etileno: el hecho de ser un subproducto en el proceso de producción del etileno condujo a la apertura de diversas áreas de aplicación industrial para el propileno. Productos derivados del propeno como el polipropileno, el cumeno y el óxido de propileno han hecho aumentar la relevancia del propileno (1).

2.1.1. Propiedades

El propeno, en condiciones atmosféricas, es un gas invisible y más pesado que el aire. Tiene un aroma levemente dulce y arde fácilmente en el aire a partir de una cierta concentración. Se trata de un isómero del ciclopropano. Debido a la similitud de su punto de ebullición con el del propano, que es relativamente inerte, este suele ser la impureza más común presente en el propileno utilizado tanto en laboratorio como en procesos comerciales.

A continuación, en la Tabla 1, se muestran las propiedades físicas y termodinámicas del propileno.

Tabla 1. Propiedades físicas y termodinámicas del propileno. Fuente: (2)

Propiedad	Valor
Peso molecular, <i>g/mol</i>	42,08
Punto de ebullición, °C	-47,7
Punto triple, °C	-185,25
Densidad de vapor (aire=1)	0,5053
Viscosidad, <i>cP</i> a -185°C	1,49
Calor específico, <i>J/(mol)(°C)</i> a 25°C	63,83
Entalpía de vaporización, <i>J/g</i> a -47,7°C	27,87
Entalpía de combustión, <i>kJ/mol</i>	1,92
Temperatura crítica, °C	0,44
Presión crítica, <i>bar</i>	93,12
Densidad crítica, <i>kg/m³</i>	233
Límites de inflamabilidad en aire, % vol	
• Superior	11,1
• Inferior	2

Las propiedades químicas del propileno se caracterizan por la reactividad de su doble enlace, que puede ser visualizado en la Figura 1. Se trata de una molécula formada por tres átomos de carbono y seis átomos de hidrógeno, por consiguiente, su fórmula molecular es C₃H₆. El propeno experimenta reacciones químicas de gran relevancia industrial, entre las que destacan las reacciones de polimerización, adición y oxidación.

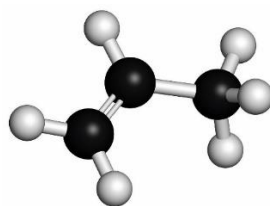


Figura 1. Estructura tridimensional del propeno. Fuente: (3)

2.1.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad y seguridad

Existe una extensa red de tuberías para el transporte de propeno en algunas zonas. Sin embargo, en la mayoría de los lugares el propeno se transporta por carretera, o bien por transporte ferroviario o marítimo. Además, el suministro discontinuo de este producto requiere la disponibilidad de grandes capacidades de almacenamiento en tanques, tanto por parte de los productores como de los consumidores de propileno.

El propeno líquido normalmente se almacena a temperatura ambiente en tanques a presión esféricos con diámetros de hasta 20 m. El transporte por carretera o ferrocarril se realiza en

tanques cilíndricos presurizados a temperatura ambiente. En lo relativo al transporte marítimo, se emplean baterías de pequeños tanques presurizados o tanques a presión atmosférica de grandes dimensiones con dispositivos de relicuefacción.

Los requerimientos de calidad del propileno varían ampliamente dependiendo del uso al que se destine. En las plantas de craqueo es posible obtener propileno de distintas calidades, normalmente son utilizadas las denominadas: propileno de grado polimérico (referido al propileno con una pureza superior al 99,5%) y propileno de grado químico (con pureza inferior a la de grado polimérico) (1). También es común encontrar propileno de grado de refinería, de menor pureza que los dos anteriores.

El propileno es un gas peligroso. Presenta un peligro grave de incendio y de explosión, pero no es particularmente tóxico. De ser inhalado tiene efectos anestésicos si su concentración es elevada. Por consiguiente, es una sustancia asfixiante que requiere ventilación para disipar el efecto fisiológico. Por último, el propileno líquido puede causar quemaduras cutáneas (2).

2.2. Peróxido de hidrógeno

El peróxido de hidrógeno, H_2O_2 , fue obtenido por primera vez en 1818 por Thenard al tratar peróxido de bario con ácido nítrico. Aunque ha estado disponible a nivel comercial desde mediados del siglo XIX, la magnitud de su fabricación y aplicación ha tenido una tendencia creciente desde alrededor de 1925, cuando se desarrollaron procesos de producción electrolíticos.

En los últimos años se han empleado nuevos métodos no electrolíticos más económicos para expandir la capacidad de producción. Esta sustancia es distribuida comercialmente en disolución acuosa, con un amplio rango de concentraciones. Su gran utilidad viene dada por su estructura química, la cual incluye un enlace covalente oxígeno-oxígeno. Es empleado en una amplia variedad de reacciones de oxidación tanto orgánicas como inorgánicas. Su descomposición en oxígeno y agua es altamente exotérmica (2).

2.2.1. Propiedades

El peróxido de hidrógeno es un líquido incoloro, miscible en agua en cualquier proporción. Su presentación pura al 100% es estable a temperatura ambiente, sin embargo, esta es solo de interés científico y no se comercializa a escala industrial. Un modelo tridimensional de la molécula de peróxido de hidrógeno se visualiza en la Figura 2.

Es por eso por lo que las propiedades del peróxido de hidrógeno comercial no son constantes, sino que varían de acuerdo con la concentración en agua a la que se encuentre (1). En la Tabla 2 se presenta un resumen de las propiedades de la sustancia pura.

Tabla 2. Propiedades físicas y termodinámicas del peróxido de hidrógeno puro. Fuente: (1)

Propiedad	Valor
Peso molecular, g/mol	34,01
Punto de ebullición, $^{\circ}C$ a 101,3 kPa	150,2
Punto de congelación, $^{\circ}C$	-0,43
Densidad, kg/m^3 a 25 $^{\circ}C$	1442,5
Viscosidad, $mPa.s$ a 20 $^{\circ}C$	1,249
Calor específico, $J/(g)(^{\circ}C)$ a 25 $^{\circ}C$	2,629
Entalpía de vaporización, $J/(g)(^{\circ}C)$ a 25 $^{\circ}C$	1519
en el punto de ebullición	1387
Entalpía de formación, kJ/mol a 25 $^{\circ}C$	-136,06
Temperatura crítica, $^{\circ}C$	475
Presión crítica, MPa	20,99

El peróxido de hidrógeno es un ácido débil en disolución acuosa, por ello forma sales con diversos metales. Además, puede actuar como agente oxidante o reductor. La descomposición del peróxido de hidrógeno en agua y oxígeno es extremadamente importante en su manejo y almacenamiento, pues es altamente exotérmica y tiene lugar en presencia de pequeñas cantidades de catalizador, incluso en disolución acuosa, sin embargo, en ausencia de catalizador solo ocurre en fase gaseosa a altas temperaturas. Otra reacción relevante es la de sustitución para formar peroxohidratos (1).

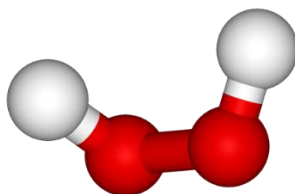


Figura 2. Estructura tridimensional del peróxido de hidrógeno. Fuente: (4)

2.2.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad y seguridad

En lo que respecta a la producción, almacenamiento y transporte del peróxido de hidrógeno, se debe tener especial precaución. Para prevenir que las posibles impurezas que catalicen la reacción de descomposición entren en contacto con la disolución de peróxido, es necesario asegurar una manipulación del producto en contenedores perfectamente limpios. Debido a que se vuelve inevitable que se encuentren algunas trazas de impurezas en la disolución, es importante el empleo de estabilizantes. Además, el aluminio y los aceros inoxidable son materiales de construcción adecuados para el manejo de peróxido de hidrógeno.

Es realmente fundamental asegurar que no haya nada de peróxido de hidrógeno atrapado, por ejemplo, entre dos válvulas cerradas. Si ocurre la descomposición, esto conllevaría a muy altas presiones, lo que resultaría en explosiones severas. Asimismo, el peróxido de hidrógeno tiene una alta energía debido a la reacción de descomposición. Conjuntamente, su alto contenido en oxígeno está disponible para reacciones de combustión y la oxidación de compuestos orgánicos. Esto implica que deben ser aplicadas condiciones especiales de seguridad cuando se trabaja con H_2O_2 , llevando a cabo diversos estudios de seguridad de acuerdo a la fase y concentración en la que se encuentre (1).

3. PRODUCTO: ÓXIDO DE PROPILENO

El nombre dado por la IUPAC a este compuesto es metiloxirano. También se emplean como sinónimos óxido de propileno (PO), 1,2-epoxipropano u óxido de metil etileno.

El óxido de propileno es uno de los materiales de partida más empleados en la industria química. Su mercado está en continuo crecimiento debido a las numerosas aplicaciones de sus productos derivados. Se emplea mayoritariamente para conseguir polioles de poliéter que son utilizados para la obtención de espumas de poliuretanos. Asimismo, se utiliza para la obtención de glicoles de propeno y éteres de glicol de propeno, los cuales son empleados en la elaboración de poliésteres y disolventes, respectivamente.

La molécula del óxido de propileno es quiral y está formada por tres átomos de carbono, un átomo de oxígeno y seis de hidrógeno. Su fórmula molecular se corresponde a C_3H_6O . Perteneció al grupo de los epóxidos: se trata de un éter cíclico que contiene un anillo formado por un átomo de oxígeno unido a dos de carbono. Su estructura tridimensional se muestra en la Figura 3.

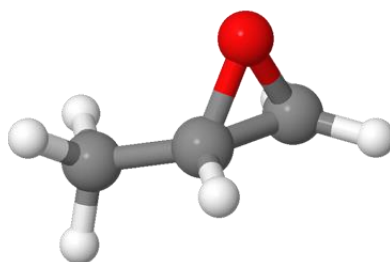


Figura 3. Estructura tridimensional del PO. Fuente: (5)

3.1. Contexto histórico

El PO es una sustancia química de gran importancia desde mediados del siglo pasado. Fue preparado por primera vez en 1860 por Oser haciendo reaccionar propileno con ácido hipocloroso. Un siglo después, este pasaría a convertirse en el método clásico y mayoritario de síntesis de PO, denominado proceso de la clorhidrina. A finales del siglo XX ganaron también relevancia los procesos de producción de este compuesto químico haciendo uso de hidroperóxidos, a partir de

los cuales se obtienen coproductos de valor. Sin embargo, el problema del desecho de los residuos generados en el proceso de la clorhidrina y la elevada cantidad de coproductos generados en los procesos que emplean hidroperóxidos ha llevado al desarrollo de numerosas investigaciones en búsqueda de vías alternativas para conseguir el óxido de propileno.

Así, ha sido desarrollado un proceso que soluciona los problemas anteriores, denominado HPPO. En este se obtiene el óxido de propileno a partir de la oxidación de propileno empleando peróxido de hidrógeno. Por esta razón, en los últimos años se han construido nuevas plantas industriales de PO que ya emplean esta tecnología de vanguardia. Además, hay que mencionar la existencia de otros métodos de producción de PO que aún se encuentran en fase de desarrollo y que, de ser posible en un futuro su implantación a escala industrial, supondrían elevados ahorros energético e importantes beneficios medioambientales. Más adelante se analizarán cada una de las alternativas existentes para la obtención de PO.

3.2. Propiedades físicas y termodinámicas

El óxido de propileno es un líquido incoloro, muy volátil y con un leve olor a éter. Resulta muy inflamable, posee un amplio rango de explosividad y es moderadamente tóxico. Tiene una solubilidad limitada en el agua, pero es miscible en gran variedad de disolventes orgánicos (6). En la Tabla 3 se encuentran resumidas las propiedades físicas del óxido de propileno. Aunque el óxido de propileno puede existir en forma de dos isómeros ópticos, se considerará a lo largo del proyecto una mezcla racémica, dado que es el producto comercial usual (2).

Tabla 3. Propiedades físicas y termodinámicas del óxido de propileno. Fuente: (2)

Propiedad	Valor
Peso molecular, g/mol	58,08
Punto de ebullición, $^{\circ}C$ a 1,013 bar	34,23
Presión de vapor, bar a 25 $^{\circ}C$	0,76
Punto de congelación, $^{\circ}C$	-112,13
Gravedad específica, 25/25 $^{\circ}C$	0,826
Densidad, kg/m^3 a 25 $^{\circ}C$	823
Viscosidad, cP a 25 $^{\circ}C$	0,28
Calor específico, $J/(g)(^{\circ}C)$ a 0 $^{\circ}C$	1,96
Entalpía de vaporización, kJ/mol a 25 $^{\circ}C$	27,87
Entalpía de combustión, kJ/mol a 25 $^{\circ}C$	191,03
Entalpía de formación, kJ/mol líq. a 25 $^{\circ}C$	120,55
Temperatura crítica, $^{\circ}C$	209,1
Presión crítica, atm	49,24
Densidad crítica, kg/m^3	312

3.3. Propiedades químicas

Como consecuencia del carbón asimétrico de la molécula, junto con la elevada tensión ocasionada por el anillo de oxirano, el óxido de propileno reacciona con una amplia variedad de reactivos. Las reacciones con ácidos minerales y amoníaco ocurren de forma espontánea a temperatura ambiente y en ausencia de catalizador. Sin embargo, para la mayoría de las restantes reacciones se hace necesario el empleo de catalizadores. Resumidamente, el PO reacciona con agentes oxidantes y ácidos fuertes, así como reactivos de Grignard y componentes de organolitio (2).

A continuación, se presentarán y comentarán las reacciones más relevantes.

- Reacción con agua: el óxido de propileno reacciona con agua para la formación de mono-, di-, tri- y glicoles de polipropileno. Esta reacción es catalizada con ácidos o bases, aunque en la práctica, para la producción de propilenglicol, es llevada a cabo a elevadas temperaturas (entre 160-200°C) sin catalizador. De esta forma se logra simplificar la recuperación de productos.
- Reacción con alcoholes y fenoles: con alcoholes o fenoles, el óxido de propileno da lugar a éteres de glicol que, asimismo, pueden reaccionar para formar éteres de di- o tri- glicol de polipropileno. Cuando la reacción es catalizada con una base, se forma mayoritariamente el alcohol secundario, mientras que si se emplea un ácido se forman los dos isómeros en las mismas cantidades.
- Reacción con aminas: el óxido de propileno, en su reacción con el amoníaco, formará, incluso sin catalizador, mono-, di- y triisopropanol aminas, RNH_2 , R_2NH , Y R_3N , donde R es principalmente el alcohol secundario $CH_2CHOHCH_2$.
- Reacción con ácidos orgánicos: se obtienen monoésteres de glicol.
- Reacción con productos naturales: el óxido de propileno reacciona con grupos de hidroxilo presentes en azúcares, celulosa, glicerol y almidón, entre otros, en presencia de un catalizador alcalino, formándose derivados de poliglicoles y ésteres de hidroxipropilo.

3.4. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad y seguridad

Debido a la tendencia del óxido de propileno a polimerizarse, el material normalmente empleado para la construcción de tanques de almacenamiento del PO es acero inoxidable. Todos los equipos deben estar libres de impurezas y los tanques de almacenamiento deben poder vaciarse y limpiarse completamente. El uso de tanques aislados debe evitarse dado que la corrosión debajo del aislante puede ocasionar vertidos. Además, los tanques e instalaciones empleados en la carga y descarga de PO tienen que equiparse con muros de contención de derrames o diques que dirijan los despojos a las correspondientes áreas de contención. El PO puede ser transportado en buques, vagones de ferrocarril, camiones cisterna y contenedores.

Existen diferentes procesos para la obtención del óxido de propeno, sin embargo, todos tienen en común la elevada pureza del PO manufacturado. La calidad de la alimentación de propeno contribuye significativamente al contenido en impurezas del producto final. Es preferible el propeno de grado polimérico para así reducir la formación de acetaldehído y óxido de etileno (1).

Este compuesto químico es un producto intermedio muy reactivo. El óxido de propileno reacciona con todos los componentes que contengan hidrógeno activo. Debe evitarse el contacto con materiales como ácidos, bases, oxidantes y absorbentes a base de arcilla. En general, los peligros para la salud en el manejo de PO están asociados con la inhalación del vapor y el contacto con ojos y cara. Se pueden dar concentraciones tóxicas de óxido de propileno en espacios poco ventilados (2).

4. ANÁLISIS DE MERCADO

El óxido de propileno, usualmente abreviado como PO por su nombre en inglés, es un producto químico intermedio producido a gran escala mundialmente. Desde mediados del siglo pasado, se ha convertido en uno de los mayores derivados del propileno en ser manufacturado. Actualmente, su producción a nivel global supera los 10 millones de toneladas anuales y es mayormente empleado para la síntesis de polioles, glicol de propileno y éteres de glicol de propileno (7). A continuación, se realizará el estudio de mercado del óxido de propileno, analizando la demanda actual y futura, los precios y su evolución, las empresas líderes del sector, exportaciones e importaciones, entre otros aspectos claves para determinar la existencia de condiciones óptimas en el mercado a la hora de elaborar el producto químico en cuestión.

4.1. Panorama global

El mercado del óxido de propileno actualmente se divide entre las siguientes regiones: Asia-Pacífico y Oriente Medio, América del Norte, Europa, América del Sur y África.

La capacidad de producción de óxido de propileno es liderada actualmente por los países asiáticos, como es posible observar en la Figura 4. Se espera que la demanda global aumente en los próximos años debido al fortalecimiento de la economía mundial y a una mayor disponibilidad de óxido de propileno. Las regiones con mayor crecimiento de la demanda de este producto son Asia-Pacífico y Oriente Medio, donde se está materializando la mejora de los estándares de vida, lo cual provoca una gran necesidad de un alto rango de polímeros y productos químicos (8). En Norteamérica y Europa Occidental, sin embargo, se verá una demanda estacionaria debido a la disminución de oportunidades a la hora de exportar, gracias al desarrollo industrial asiático. Además, en Centroeuropa se espera un incremento de la demanda por la instalación de un nuevo complejo industrial que se pondrá en marcha para el año 2021 en Hungría (9).

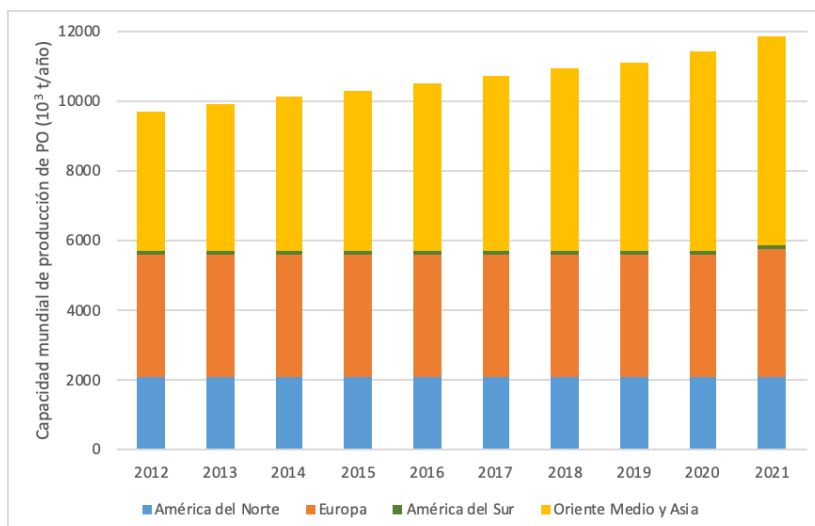


Figura 4. Producción mundial de PO. Fuente: elaboración propia a partir de (7)

Cabe destacar que, aunque de la Figura 4 se observa que en la última década la región de Asia Pacífico y Oriente Medio dominó el mercado de producción, esto no ha sido siempre así: en el pasado siglo la mayor parte del óxido de propileno, como se expresa en la Tabla 4, provenía de América del Norte y Europa. Sin embargo, el rápido desarrollo de economías emergentes fue responsable de este cambio.

Tabla 4. Capacidad de producción de PO en 1986. Fuente: (6)

Región	Capacidad (10³ ton/año)	%
Hemisferio Occidental	1515	53
Europa Occidental	1090	38
Asia	275	9
Total	2880	100

En la actualidad, la producción de óxido de propileno mundial no es capaz de satisfacer la demanda generada por la industria, y, por lo tanto, se ha planificado la construcción de nuevas plantas de producción en Asia, América del Norte y en los países pertenecientes a la Comunidad de Estados Independientes (10). Según estudios económicos consultados (8), desde el año 2013 la capacidad de producción del PO ha aumentado siguiendo una tasa anual del 3%, mientras que el consumo crece de manera más rápida, con una media de 4,2% anual, lo cual verifica lo expresado anteriormente y genera un escenario favorable para las nuevas instalaciones productoras de este bien.

4.2. Mercado de productos derivados del óxido de propileno

Entre los motivos del crecimiento del mercado de este producto destacan la aumentada demanda de polioles para la producción de poliésteres y el gran abanico de aplicaciones de los glicoles de propileno.

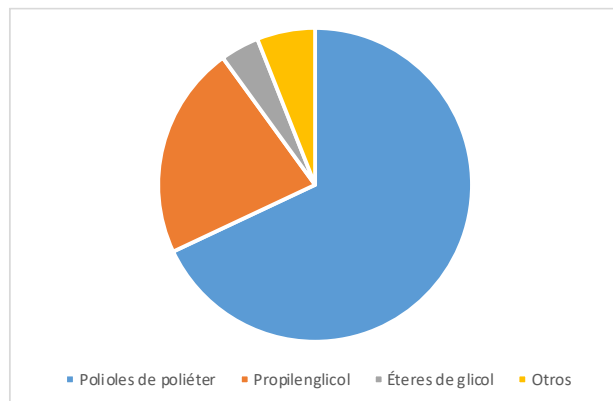


Figura 5. Usos principales del óxido de propileno. Fuente: elaboración propia a partir de (11)

El consumo de óxido de propileno está dominado por los polioles de poliéster que, como se observa en la Figura 5, representa en torno al 70% del uso de este producto químico. Haciendo reaccionar los polioles con isocianato, se obtienen los poliuretanos. Los poliuretanos son empleados para la fabricación de diferentes productos finales, tales como espumas flexibles para la industria automovilística, muebles y espumas rígidas para el aislamiento de edificios y maquinaria.

Además, los polioles también se utilizan para revestimientos, adhesivos, selladores y elastómeros, así como fibras y resinas termoplásticas. Este producto es ideal como aislante debido a su elevada resistencia térmica y baja conductividad térmica. Los polioles son relativamente sencillos de manufacturar y su producción suele ser local y fragmentada. La construcción de nuevas unidades de polioles de poliéster es relativamente sencilla y con bajo coste, sin embargo, el mayor problema suele encontrarse en la disponibilidad de óxido de propileno como material de partida. El crecimiento de la demanda de los polioles de poliéster está influenciado por su uso para espuma de poliuretano, en concreto como espumas flexibles y semirrígidas.

Debe resaltarse que la industria del poliuretano se encuentra en una etapa de desarrollo notable: involucra a más de 23500 empresas, siendo la mayoría de tamaño pequeño o mediano y en las que se emplea directamente a 800000 personas en Europa. Así, esta industria genera un valor de mercado situado en torno a 130 billones de euros. Las cinco mayores empresas productoras de este compuesto químico son BASF SE, Covestro AG, DowDuPont, Huntsman International LLC y Recticel NV. Se espera que entre los años 2019-2023 el mercado del poliuretano crezca un CAGR del 3% y aumente la capacidad total global en 1,93 millones de toneladas respecto al año 2018. Esto es debido a que la propiedad clave de la química de los poliuretanos es su enorme

versatilidad (12) (13). A nivel nacional, en España existen diversas compañías productoras de espumas de poliuretano como Interplasp, Pagola Poliuretanos, Pikolin, Recticel Ibérica o Torres Espic. Se puede subrayar, además, que en Barcelona y Tarragona se encuentran plantas de producción de dispersiones de poliuretano de la compañía multinacional alemana Covestro, filial de Bayer (14).

El segundo mayor consumidor de óxido de propileno, tal y como se indica en la Figura 5, es el propilenglicol, abarcando en torno al 20% del total producido. Este es mayormente utilizado para la obtención de resinas de poliéster insaturadas que normalmente se refuerzan con fibras de vidrio para formar plásticos reforzados, con gran aplicación en el ámbito de la construcción. Así, estos son empleados para elaborar paneles de construcción, elementos de baños, tanques resistentes a la corrosión, tuberías, conductos y accesorios. Además, los propilenglicoles también son utilizados como refrigerantes, anticongelantes, fluidos de deshielo para aviones y como fluidos de transferencia de calor. Hay que destacar que el propilenglicol es preferible al etilenglicol debido a su menor toxicidad. Este, junto al dipropilenglicol y tripropilenglicol, se emplea también en la industria cosmética y el cuidado personal para disolventes, humectantes y preservativos.

Por último, los éteres de propilenglicol se forman por la reacción de óxido de propileno con alcoholes como el metanol, el etanol, el propanol o el butanol, y suponen el 4% del consumo total de óxido de propileno, tal y como se puede leer de la Figura 5. Normalmente se utilizan como disolventes y agentes de acoplamiento en pinturas, en la producción de revestimientos, tintas, resinas y productos de limpieza (15).

En la región de Asia Pacífico, el fuerte crecimiento del sector de la construcción y la producción automovilística fue determinante en el incremento de la demanda del óxido de propileno. En concreto, China se encuentra sumergida en varios proyectos de construcción de aeropuertos. Por otro lado, Filipinas, Vietnam e Indonesia también están aumentando la construcción tanto de edificios residenciales como comerciales y en India, Malasia, Tailandia e Indonesia se están realizando importantes inversiones en el sector automovilístico. En lo relativo al continente africano y Oriente Medio, la creciente construcción de hoteles e infraestructuras públicas han impulsado también el sector de la construcción. Además, en Norteamérica la alta demanda de viviendas por el aumento poblacional junto con la reactivación en Europa del sector de la construcción ha llevado a un incremento en la necesidad de materiales de construcción producidos a partir de óxido de propileno (16). De esta forma es posible concluir que existe una demanda constante de óxido de propileno a largo plazo a nivel mundial.

4.3. Mercado del óxido de propileno

En el año 2016, el mercado del óxido de propileno supuso una cifra de negocios de 12,74 billones de dólares americanos y, por las previsiones de crecimiento en su demanda, se espera que para el 2022 se alcancen los 17,53 billones (17).

El mercado del óxido de propileno está dominado a nivel mundial por dos empresas. Estas son The Dow Chemical Company y LyondellBasell Industries N.V. (8). Por otra parte, en el ámbito europeo, las compañías productoras de PO más importantes son las indicadas en la Tabla 5, y es posible detallar que la capacidad de producción más común entre estas es de alrededor de 200 mil toneladas de óxido por año. Cabe destacar que, la planta de BASF/Dow ubicada en Antwerp, Bélgica es la precursora europea en aplicar a nivel industrial el proceso de HPPO (18).

Tabla 5. Capacidad de producción de PO en Europa. Fuente: (19)

Empresa	Ubicación	Capacidad (10 ³ ton/año)
Dow Chemical	Stade, Alemania	630
LyondellBasell Bayer Manufacturing Maasvlakte	Maasvlakte, Países Bajos	315
BASF/Dow	Antwerp, Bélgica	300
LyondellBasell	Botlek, Países Bajos	260
Ellba (Shell/BASF)	Moerdijk, Países Bajos	250
Shell	Moerdijk, Países Bajos	210
INEOS Oxide	Colonia, Alemania	210
LyondellBasell	Fos, Francia	210
Repsol Química	Tarragona, España	200
BASF	Ludwigshafen, Alemania	125
Oltchim	Rimnicu Vilcea, Rumanía	110
PCC Rokita	Brzeg Dolny, Polonia	40

El óxido de propileno en España es fabricado en la refinería de Repsol ubicada en Tarragona, con una producción anual de 200 mil toneladas anuales (Tabla 5). En esta, el PO manufacturado se obtiene en el proceso de coproducción con estireno, el cual será discutido en el apartado de alternativas. Es importante mencionar que, aunque el óxido de propileno es un material peligroso por su inflamabilidad, reactividad y toxicidad, puede ser distribuido y manipulado de forma segura tomando las medidas adecuadas (20).

4.4. Evolución de precios, exportaciones e importaciones

A la hora de realizar un estudio de mercado, es clave analizar y evaluar la variación en los precios en los últimos años para poder prever futuras tendencias que condicionen las ventas y producción del óxido de propileno. En la Figura 6 se presenta la evolución que tuvo el precio del producto químico de estudio a lo largo del año 2016. En la gráfica es posible observar que este sufre grandes

oscilaciones en el tiempo, y, como se detallará más adelante, esto es una consecuencia directa de su dependencia del precio del petróleo.



Figura 6. Evolución del precio del óxido de propileno durante el año 2016. Fuente: (21)

En la Tabla 6 se pueden observar los rangos de variación de los precios de mercado de los diferentes compuestos químicos vinculados al óxido de propileno, dado que los cambios que estos puedan sufrir afectarán de manera directa a su producción.

Tabla 6. Rango de precios de venta. Fuente: (22), (23), (24), (25), (26)

Producto Químico	Precio (€/ton)
Propileno de grado polimérico	850-1210
Peróxido de hidrógeno	426-624
Óxido de propileno	1522-1638
Poliuretano	6672-7578
Propilenglicol	1612-1693

Debe ser señalado que, aunque el óxido de propileno se obtiene directamente a partir de propileno y agua oxigenada, es de especial relevancia conocer el precio del crudo, dado que este condicionará la producción del propileno. El propileno es una olefina ligera que se obtiene en las unidades de cracking catalítico de las refinerías (20). Los precios del crudo están influenciados por una gran variedad de factores, pero son especialmente sensibles a las decisiones tomadas por la Organización de Países Exportadores de Petróleo (OPEP). Como cualquier producto que se encuentre en el mercado, la ley de la oferta y la demanda condiciona los precios, pero también tienen un gran impacto los desastres naturales que puedan ocasionar perturbaciones en la producción, así como problemas geopolíticos que se dan en países petroleros, tales como los localizados en Oriente Medio. Todo esto produce una gran volatilidad en el precio de mercado del barril de crudo, cuya evolución temporal se muestra en la Figura 7.

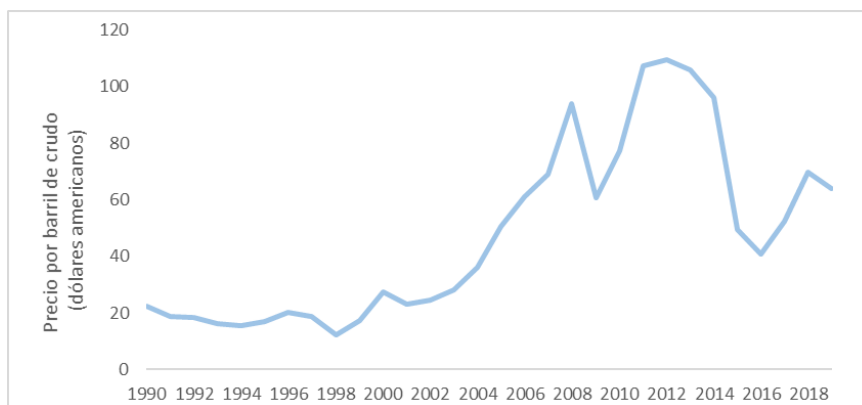


Figura 7. Evolución del precio del barril de crudo. Fuente: elaboración propia a partir de datos recogidos en (27).

Con respecto a las relaciones exteriores de comercio del óxido de propileno, en la Figura 8 se presenta una gráfica con los datos disponibles de exportaciones e importaciones entre Europa y el resto del mundo durante el periodo comprendido entre los años 2000 a 2017, y se puede apreciar una tendencia variable a lo largo del tiempo. En esta gráfica se observa que las importaciones son, por lo general, mayores que las exportaciones, especialmente en los últimos años, donde estas han disminuido en una gran proporción. Los principales destinos de exportación desde la Unión Europea son Suiza, la República de Corea, China, otros países de Asia y Estados Unidos. Los países que han importado a la EU-28 a lo largo de estos años son principalmente Estados Unidos, Brasil, Singapur, Tailandia y Rusia.

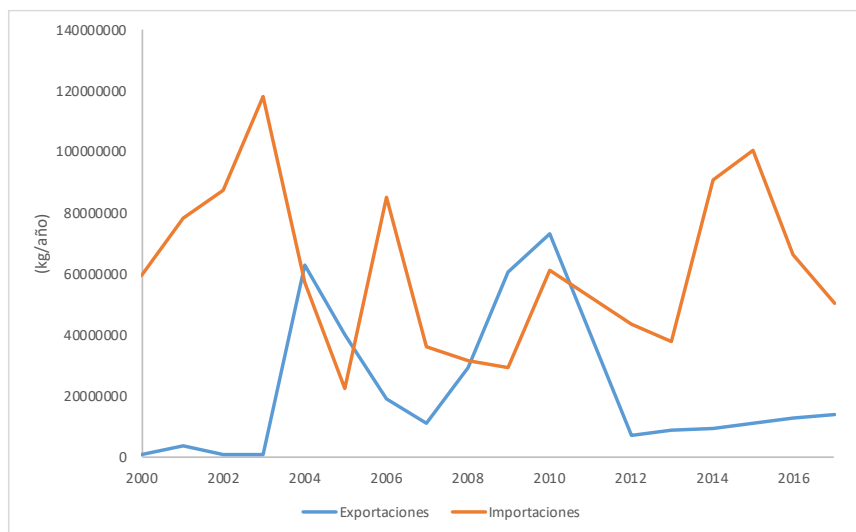


Figura 8. Evolución del comercio entre la EU-28 y el resto del mundo. Fuente: elaboración propia a partir de datos recogidos en (28)

Centrando ahora el estudio en los datos del comercio exterior referido a España, se presenta la Figura 9, en la que se observa una tendencia diferente a la que mantiene la Unión Europea, pues ambos flujos se pueden considerar relativamente constantes a lo largo del tiempo. Las

importaciones, sin duda, son predominantes en este país, siendo significativamente mayores en todo momento que las exportaciones. En cuanto a la importación, los países más importantes con los que se relaciona España son Francia, Alemania, Países Bajos y Estados Unidos, mientras que, en el caso de la exportación, los principales destinos son Portugal, Italia, Países Bajos y Bélgica.

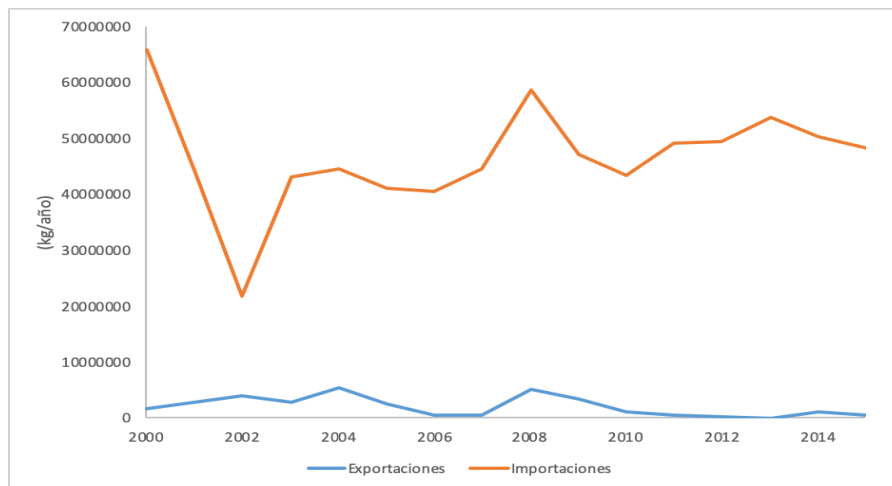


Figura 9. Evolución del comercio entre España y el resto del mundo. Fuente: elaboración propia a partir de datos recogidos en (28)

4.5. Justificación de la capacidad de producción

Tomando en cuenta los datos observados en la Tabla 5 como un antecedente de magnitudes de producción media, además de la tendencia del mercado con respecto a la demanda creciente de PO a nivel mundial y el gran volumen de importaciones llevadas a cabo en España, se ha optado por diseñar la planta de óxido de propileno para una capacidad de producción de 150 mil toneladas anuales. A partir de esta se buscará satisfacer parte de la necesidad actual y, sobre todo, futura, de óxido de propileno no abarcada por las industrias existentes en el sector. Además, se considera un valor de producción adecuado, pues al compararlo con los datos encontrados de producción de empresas que emplean la tecnología que será tomada como base para el diseño de esta planta (HPPO), se observa que con dicha tecnología es posible producir la capacidad anual seleccionada.

4.6. Mercado de materiales de partida

Para un estudio completo acerca de la producción de óxido de propileno, es fundamental evaluar los compuestos necesarios para su fabricación y las tendencias que estos tienen en el mercado. Esencialmente, se puede recalcar que los dos componentes necesarios para la obtención del PO mediante el proceso HPPO (*Hydrogen Peroxide to Propylene Oxide*) son el propileno y el peróxido de hidrógeno.

Esta última es una sustancia muy versátil y amigable con el medio ambiente. Por ello, es ampliamente utilizada para diversas aplicaciones en la industria química. Es empleada principalmente como agente oxidante, desinfectante y blanqueador. Algunos mercados en los que

se consume son los de agricultura, papel, alimentación, plásticos, e incluso en el sector aeronáutico como propelente de cohetes (29). A nivel industrial, es comercializada en distintas concentraciones de disolución en agua, siendo las más comunes las de 70, 60, 50 y 35 por ciento (30). En Europa, las empresas productoras de peróxido de hidrógeno más importantes son Ercros S.A., PeroxyChem, Arkema, Belinka Perkemija, Evonik Industries AG, Nouryon Chemicals Holding B.V., Kemira, Solvay y Treibacher (31). Por otro lado, en el ámbito español destacan las dos primeras mencionadas, Ercros S.A. y PeroxyChem, ubicadas en las provincias de Huesca y Zaragoza, respectivamente. Al observar el abanico de alternativas de industrias fabricantes de este recurso en Europa y, específicamente en España, es posible suponer que tendrán capacidad de satisfacer la demanda generada por la planta de óxido de propileno en cuestión.

En el caso del propileno, este consiste en un compuesto altamente producido en todo el mundo por su gran variedad de usos. De hecho, es la segunda olefina, después del etileno, más comercializada globalmente (32). Es distribuido en tres presentaciones: grado polimérico con una pureza mínima de 99,5%, grado químico con 90-96% de pureza y grado de refinería, puro al 50-70% (32). En la Figura 10 se presenta la evolución del consumo de propileno durante un periodo de 20 años, especificando las aplicaciones para las que fue destinado. Este gas es empleado principalmente para la fabricación de polipropileno (PP). También para óxido de propileno (PO), cumeno, oxoalcoholes (oxo) y acrilonitrilo, aparte de otros compuestos varios.

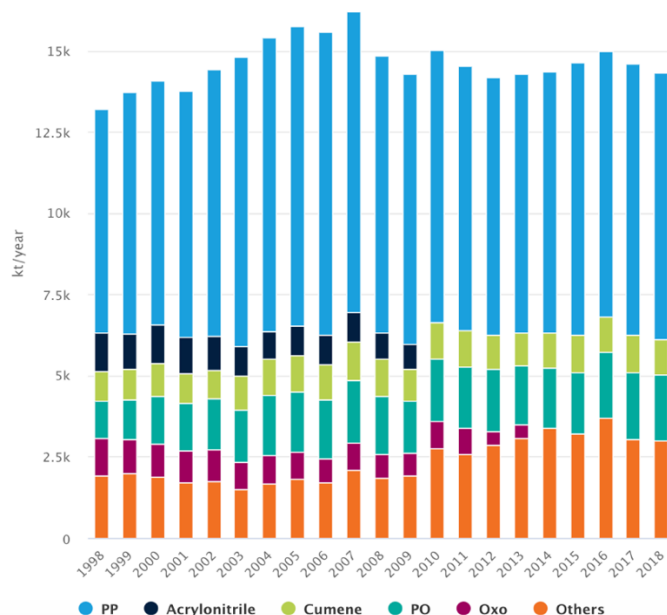


Figura 10. Consumo de propileno para producción de derivados en EU15 + Noruega. Fuente: (33).

Cabe recalcar que el propileno es obtenido a través de procesos llevados a cabo en refinerías de petróleo, por lo que estas industrias son las proveedoras de dicho producto. A nivel europeo existen numerosas instalaciones dedicadas al refino, las cuales, en conjunto, producen alrededor

de 14,5 millones de toneladas anuales de propileno. En la Figura 11 se presentan los datos de la producción y consumo anual en Europa Occidental a lo largo de las últimas dos décadas.

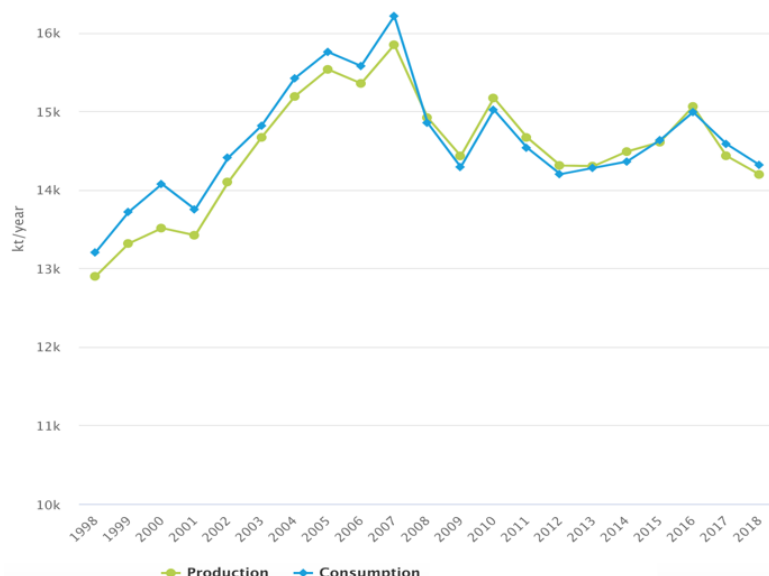


Figura 11. Producción y consumo de propileno en Europa Occidental (EU15 + Noruega). Fuente: (33).

En España, específicamente, existen 5 complejos industriales pertenecientes al grupo Repsol ubicados en las ciudades de Bilbao, Puertollano, A Coruña, Cartagena y Tarragona donde es producido el propileno. También, la empresa Cepsa cuenta con tres industrias localizadas en Tenerife, Algeciras y Huelva. Finalmente, la petrolera BP cuenta con una refinería en Castellón. Esta información es observada en la Figura 12, donde además se ha plasmado la capacidad de destilado atmosférico de crudo en Mt/a (millones de toneladas por año).

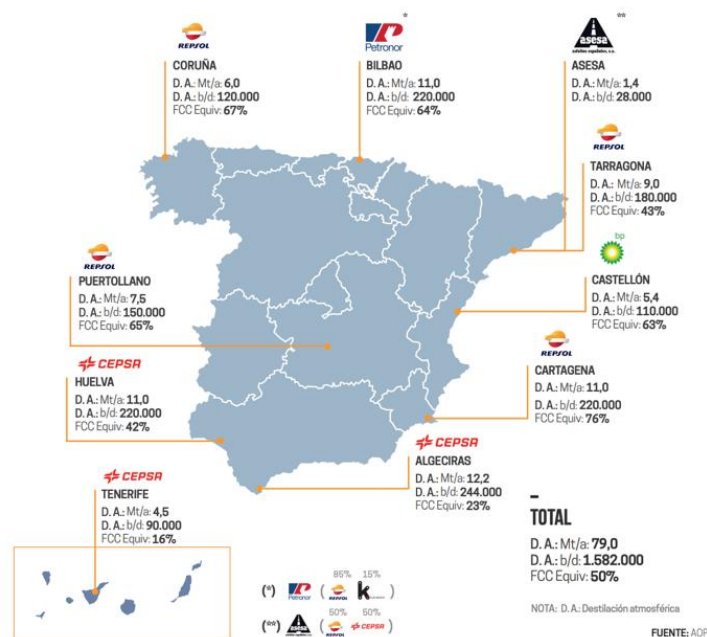


Figura 12. Distribución de refinerías de petróleo en España. Fuente: (34)

4.7. Síntesis

Todo lo expuesto previamente es posible resumirlo en las siguientes líneas.

En lo relativo al panorama global, en la última década la región de Asia-Pacífico se ha colocado a la cabeza en lo referente a producción de óxido de propileno. Debido a la alta demanda de esta sustancia, no es posible satisfacer toda la necesidad existente en el mercado, por consiguiente, se están construyendo diversas plantas químicas para solventar este déficit.

El creciente mercado de los productos derivados del óxido de propileno justifica el aumento de las necesidades de este compuesto por parte de las industrias, para la manufactura de polioles, principalmente para obtener poliésteres, y glicoles de propileno. Las industrias de la construcción y la automovilística marcarán sobre todo la necesidad de estos productos.

El precio del óxido de propileno está condicionado en gran medida por el del propileno, que, a su vez, está marcado por el valor del barril de crudo. El precio del crudo se caracteriza por su gran volatilidad dado que sufre fácilmente fluctuaciones de haber desastres naturales o bien por conflictos geopolíticos que se dan en los países productores.

A nivel europeo, los países con mayor capacidad de producción de PO son Alemania y Países Bajos. En España, existe exclusivamente una planta en Tarragona, y las importaciones de este producto superan las exportaciones debido a que existen diversas empresas en el territorio nacional dedicadas a la manufactura de poliuretano.

Por consiguiente, se dan unas condiciones óptimas que proporcionan un nicho de mercado para la instalación de una planta de producción de óxido de propileno en España.

4.8. Situación derivada de la crisis del COVID-19

El estudio de mercado realizado en el presente proyecto fue efectuado con anterioridad a la crisis mundial causada por la pandemia del COVID-19. No obstante, los efectos de esta crisis no han sido uniformes en todos los territorios y España ha resultado uno de los países más afectados.

Como consecuencia de la entrada en vigor del Real Decreto 463/2020, de 14 de marzo, por el que se declara el estado de alarma para la gestión de la situación de crisis sanitaria ocasionada por el COVID-19 junto con el posterior Real Decreto-ley 10/2020, de 29 de marzo, en el que se ordenó la paralización de todas aquellas actividades económicas no esenciales, se produjo un parón de gran parte del tejido productivo industrial español durante los primeros días del mes de abril. El sector manufacturero español sufrió una profunda desaceleración en abril y mayo de 2020, pues, aunque la relajación de las medidas de confinamiento permitió reanudar la operación en las fábricas, la baja demanda, junto con las dificultades a la hora de obtener suministros y las

restricciones económicas, llevaron a tener que operar las plantas por debajo de su capacidad y a la reducción del número de trabajadores.

Asimismo, debido a la baja demanda y a la excesiva necesidad de almacenamiento de reservas existentes, los precios de los insumos se desplomaron bruscamente. Incluso los precios de los productos relacionados con el petróleo fueron más bajos.

Existe una gran preocupación por el impacto a largo plazo de esta pandemia en el consumo y los ingresos. Las previsiones económicas a corto plazo para España no son alentadoras, sin embargo, debe destacarse que esta crisis ha permitido entrever a la sociedad la importancia de la industria química como sector estratégico. Este hecho es de suma relevancia, pues la impulsión del sector productivo con medidas de apoyo desde las instituciones resultará clave para la recuperación de la economía y la generación de riqueza nacional. Adicionalmente, se espera que en un futuro próximo sea producida a gran escala una vacuna o tratamiento efectivo contra la enfermedad de este nuevo coronavirus. En este contexto, se espera el restablecimiento de las tendencias del mercado previas a esta crisis, resultando favorable la implantación de la planta de HPPO para la reconstrucción económica de España.

5. ESTUDIO DE ALTERNATIVAS

A continuación, se analizarán las distintas vías mediante las cuales se puede obtener el óxido de propileno. Estas se suelen clasificar por generaciones de acuerdo con la secuencia en que fueron desarrolladas. Se diferencian principalmente en el compuesto con el que reacciona el propileno, lo cual condiciona los procesos posteriores.

En la Figura 13 se muestra un diagrama de sectores en el que es posible observar la distribución del uso de las diferentes tecnologías existentes hoy en día en el mercado para la producción de óxido de propileno.

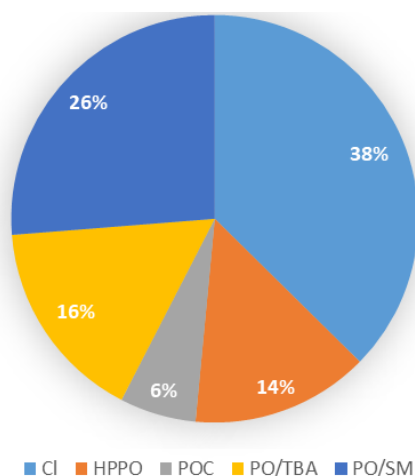


Figura 13. Tecnologías para la producción de PO. Fuente: elaboración propia a partir de datos recogidos en (7)

Uno de los factores más relevantes a la hora de analizar las diferentes alternativas serán los coproductos y subproductos obtenidos. En la Figura 14 se muestran las reacciones principales de los procesos más relevantes a nivel industrial para la obtención de PO que serán descritos y explicados en las próximas líneas.

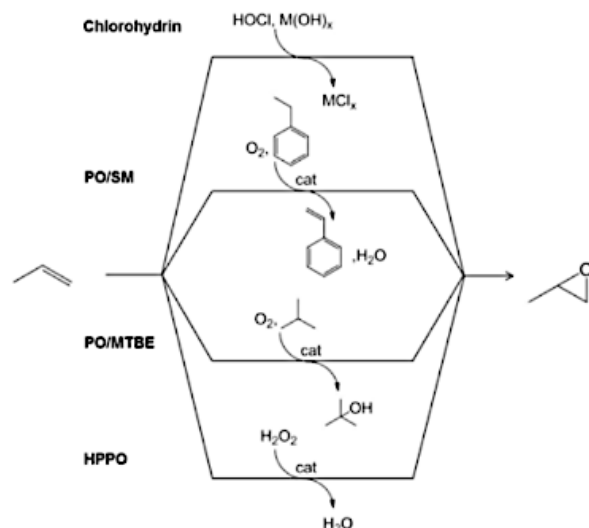


Figura 14. Reacciones de los procesos de producción de PO más relevantes. Fuente: (35)

5.1. Primera generación

5.1.1. Proceso clorhidrina (CHPO)

La síntesis de óxido de propileno siguiendo la ruta de clorhidrina fue por primera vez descrito en 1859 por el químico francés Charles Adolphe Wurtz. En esta reacción, el alqueno reacciona con ácido hipocloroso para producir clorhidrina. Este compuesto es posteriormente deshidroclorinado empleando una disolución acuosa de hidróxido de potasio para producir el epóxido. Esta ruta ha sido durante varios años la empleada en la mayor parte de procesos para la producción, no solo de óxido de propileno, sino también de óxido de etileno. Alrededor de 1940, en el caso de este último, esta vía comenzó a ser desplazada por la epoxidación del etano debido al desarrollo de un proceso de epoxidación directa más eficiente empleando un catalizador de plata. Como consecuencia, muchas plantas de producción de etileno que usaban el proceso clorhidrina se pasaron a la producción de propileno por esta misma vía.

Actualmente, este proceso continúa en uso para la epoxidación de propileno y es a partir del cual se produce la mayor parte del óxido de propileno hoy en día: el 38% del producido sigue esta ruta, como se observa en la Figura 13. No obstante, está siendo gradualmente reemplazado por procesos menos dañinos para el medio ambiente de los que se hablará más adelante. En la Figura 15 se muestra el diagrama de bloques que sigue este proceso.

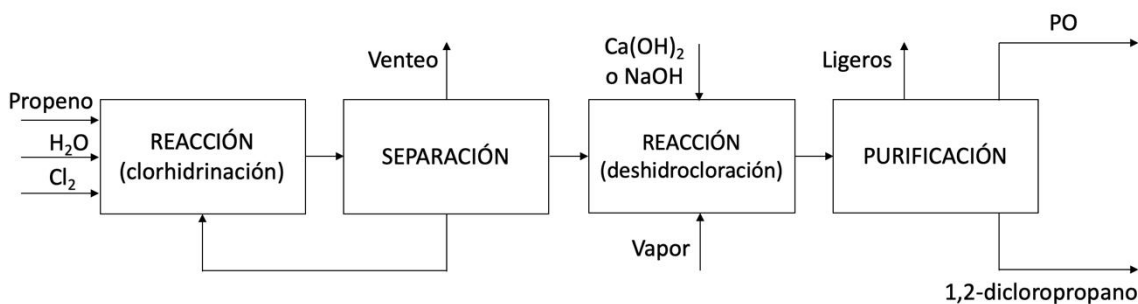
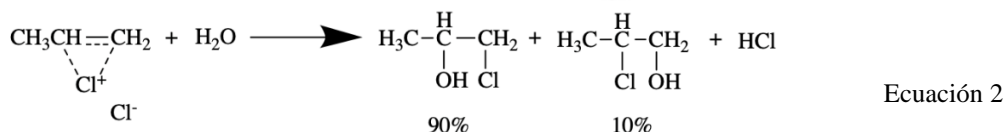
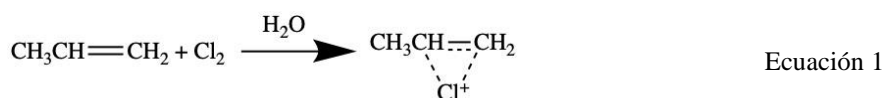


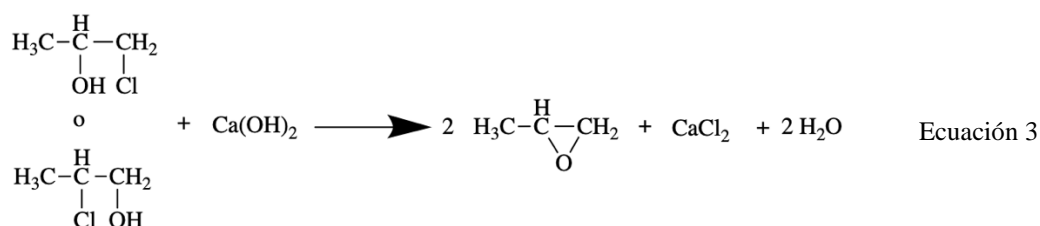
Figura 15. Diagrama de bloques del proceso clorhidrina de obtención de PO. Fuente: elaboración propia a partir de (1).

Siguiendo esta vía, en el primer reactor (donde se realiza la clorhidrinación) tienen lugar dos etapas de reacción: primeramente, se hace reaccionar el propileno con cloro en un medio acuoso, produciéndose así el complejo de cloronio de propeno. A continuación, le sigue la segunda etapa de la reacción, donde el complejo recién formado reacciona con agua dando lugar a dos isómeros de propeno de clorhidrina. Este proceso se refleja en las siguientes reacciones.



La selectividad de estas reacciones para producir los isómeros de clorhidrina se sitúa en torno al 90 – 95%. Principalmente como subproductos se forman 1,2-dicloropropano y pequeñas cantidades de dicloropropanoles, al reaccionar en fase gas el propeno con los cloruros. Hay que destacar también la formación de éteres de dicloroisopropil, por la reacción del complejo de cloronio con propeno de clorhidrina. Normalmente, la clorhidración tiene lugar en un reactor tipo columna de borboteo a una presión de 1,5 bar y temperaturas de alrededor de 323 K. La mezcla de reacción es muy corrosiva y, por consiguiente, se hace necesario el empleo de revestimientos de goma, plástico o ladrillo para los equipos.

Es en el segundo reactor donde se produce la deshidrocloración del propeno de clorhidrina anteriormente formado, empleando para esto una base, normalmente hidróxido de calcio. La reacción que tiene lugar en esta fase se visualiza en la Ecuación 3.



El óxido de propileno producido en forma de vapor es separado por *stripping* en el reactor para así prevenir la hidrólisis del producto. La deshidrocloración es llevada en la misma columna donde los productos son separados por *stripping* de la corriente de agua residual, siendo las condiciones de operación 1 bar y 373 K. Los hidrocarburos clorados que se producen en el último momento aparecen en la corriente de óxido de propileno y deben ser eliminados. La salmuera que abandona el reactor por la parte inferior contiene glicoles de propileno debido a que la hidrólisis del óxido de propileno no pudo ser evitada en su totalidad. Estos glicoles, junto a pequeñas trazas de otros hidrocarburos presentes, son eliminados mediante procesos biológicos. Asimismo, la salmuera se descarga dado que el cloruro de calcio formado como subproducto en la reacción de la Ecuación 3 no tiene ningún valor comercial. Esta es una de las mayores desventajas de este proceso, dado que la cantidad de salmuera producida, cuyo contenido de cloruro de calcio es del 5%, es en torno a 40 veces superior que el óxido de propileno obtenido y resulta de gran dificultad la eliminación de todos los hidrocarburos que hay en esta corriente de agua residual.

Además, la reutilización del cloruro de calcio no es viable desde el punto de vista económico debido al bajo valor comercial que posee. Una mejor alternativa es el uso como base del hidróxido de sodio en sustitución del hidróxido de calcio dado que como subproducto se obtendría cloruro sódico, el cual puede ser empleado para la producción de cloro y recirculado a la primera etapa del proceso. De esta manera, cambiando el tipo de base empleada es posible eliminar en gran medida el problema medioambiental de este proceso.

La corriente de salida por la parte superior del segundo reactor es purificada empleando una columna de destilación. De esta forma es posible separar el óxido de propileno del agua y los hidrocarburos clorados. Se deben tomar precauciones para evitar nuevamente la hidrólisis del óxido de propileno a glicoles de propileno. De la sección de separación se obtiene una importante cantidad de 1,2-dicloropropano (hasta el 10%) como segundo producto. Debido a que este compuesto tiene un uso muy reducido, causa problemas tanto relativos a pérdidas del rendimiento del proceso como relacionadas con su desecho.

Por consiguiente, el problema del desecho de la salmuera y los subproductos clorados formados es la principal razón de que no se estén construyendo nuevas plantas que sigan este proceso y que las más antiguas se estén cerrando en vez de modernizarlas. Se espera que exclusivamente las plantas que trabajen a gran escala (produciendo más de 100000 ton/año) continúen operando durante un largo período de tiempo, dado que estas suelen estar integradas con plantas de producción de cloro (36).

5.2. Segunda generación

Los procesos asociados con la segunda generación de fabricación de óxido de propileno se basan en métodos de coproducción, en los cuales, además de este producto, se obtienen otros

compuestos de interés. Entre dichos métodos destacan el PO/SM y PO/TBA, siendo estos los utilizados actualmente a nivel industrial (36). Esta ruta de producción consiste en hacer reaccionar un peróxido orgánico para manufacturar PO por epoxidación de propileno. A su vez, se produce el alcohol correspondiente como coproducto (7).

En el proceso de coproducción del monómero de estireno (PO/SM) se oxida etilbenceno a hidroperóxido de etilbenceno, el cual reacciona con propeno para producir óxido de propileno y 1-feniletanol. Este último es luego deshidratado para obtener estireno. Por otro lado, el método de coproducción de alcohol terbutílico (PO/TBA) está basado en la oxidación de isobutano para dar hidroperóxido de terbutil, reaccionando posteriormente con propileno, obteniendo así óxido de propeno y terbutanol. El terbutanol puede ser deshidratado a isobuteno o convertido directamente con metanol a metil terbutil éter (MTBE).

Los procesos de hidroperóxido se caracterizan por ser selectivos y por producir muchos menos desechos que el de clorhidrina. Sin embargo, su mayor desventaja es que una cantidad fija de coproducto es generada en todo momento, siendo usualmente en una proporción de 2 a 4 veces mayor a la producida de PO. Los mercados del SM o TBA no están ligados con el del PO, es por esto por lo que, si llegara a ocurrir una gran variación en la demanda de uno de los dos compuestos coproducidos, se establecería un problema de exceso de productos no deseados. El principio en el que se basan ambos métodos es similar, por lo que se tratarán simultáneamente mediante la discusión del proceso PO/SM. En la Figura 16 se presenta el diagrama de bloques correspondiente a esta alternativa.

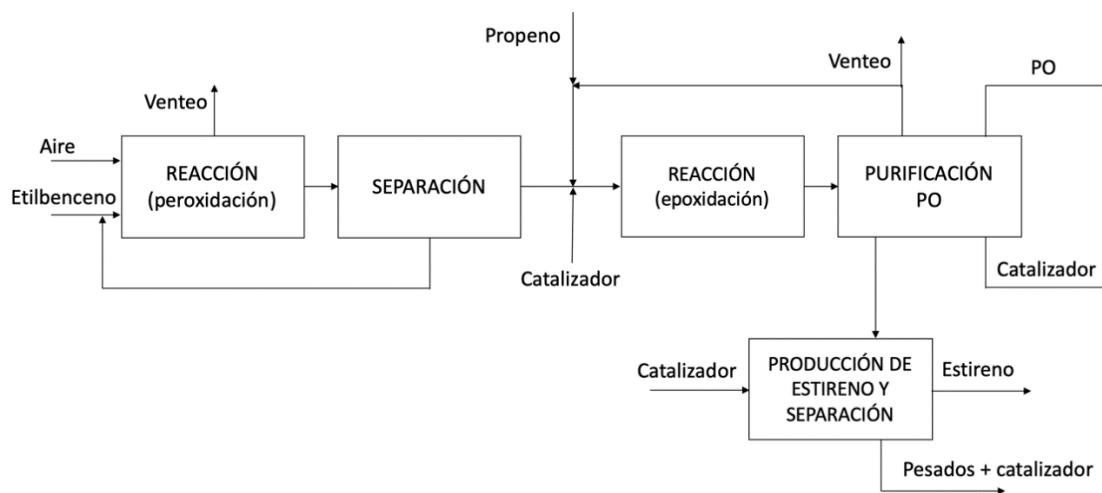
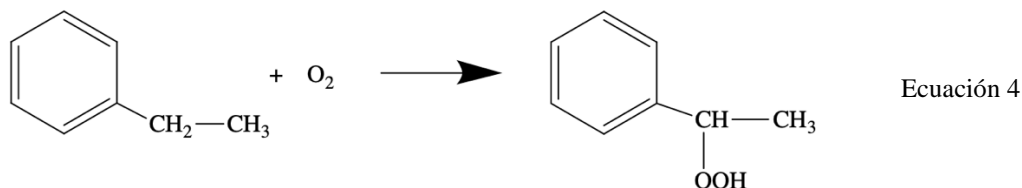


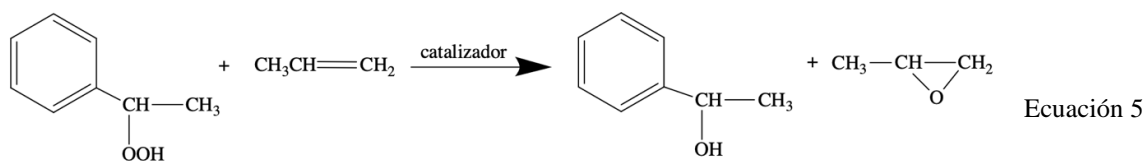
Figura 16. Diagrama de bloques del proceso PO/SM de coproducción de PO y estireno. Fuente: elaboración propia a partir de (36).

El primer reactor convierte el etilbenceno o el isobutano de forma no catalítica a su hidroperóxido correspondiente por una oxidación directa en fase líquida utilizando oxígeno o aire. La oxidación se lleva a cabo generalmente en una columna de borboteo a 400 K y 30 bar cuando se emplea

isobutano, o 423 K y 2 bar en el caso de etilbenceno. La reacción que corresponde al proceso PO/SM es la mostrada a continuación.



Una desventaja de la utilización de isobutano es que una fracción relativamente alta del hidroperóxido se descompone directamente a TBA, por lo cual se reduce la proporción de PO en los productos. Los hidrocarburos no reaccionados son separados y recirculados, mientras que la corriente del hidroperóxido es enviada a un segundo reactor, donde reacciona catalíticamente con propileno para producir óxido de propeno y un alcohol. La temperatura en este reactor es de alrededor de 373 K con una presión de 30 bar. Este suele ser un reactor compartimentado con la alimentación de propileno distribuida en etapas. La conversión del hidroperóxido suele ser mayor a un 95%, con una selectividad de PO del 95%. El único producto no deseado es acetona. La Ecuación 5 muestra la epoxidación en el sistema PO/SM.



En esta alternativa, para la reacción de epoxidación se suelen utilizar catalizadores homogéneos de tungsteno o vanadio; o heterogéneos con base de titanio. El uso de catalizadores homogéneos genera un inconveniente de separación y posterior desecho de estos. Luego del reactor, el propeno y su óxido son retirados de la corriente de líquido. Además, la corriente de alcohol puede ser deshidratada para producir estireno o isobuteno (36).

5.3. Tercera generación

La tercera generación de métodos de producción de PO ha sido desarrollada recientemente y presentan la gran ventaja de no estar afectados por el mercado de los subproductos, lo cual sí sucedía en la anterior generación. Actualmente, se emplean los procesos que parten de hidroperóxido de cumeno y peróxido de hidrógeno. Estos serán explicados y estudiados en las siguientes líneas.

5.3.1. Proceso a partir de hidroperóxido de cumeno (POC)

Este método consiste en tres etapas de reacción: un proceso para la regeneración del hidroperóxido de cumeno (CMHP) por la oxidación del cumeno (CUM) empleando aire, un proceso de epoxidación del propileno (C_3) utilizando hidroperóxido de cumeno, y una etapa para

la recuperación de cumeno por hidrogenación de alcohol α -cumyl (CMA) formado en el proceso de epoxidación. En la Figura 17 se encuentran resumidas las etapas anteriormente mencionadas.

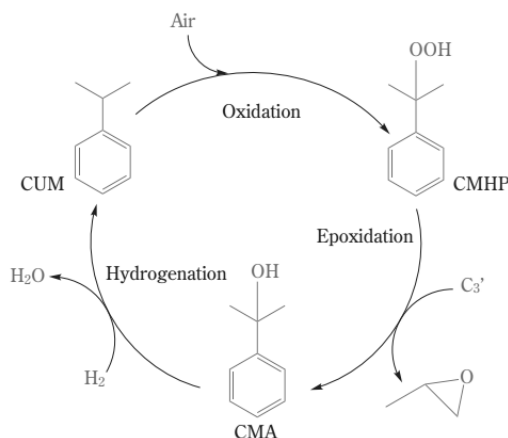


Figura 17. Proceso de producción de PO de Sumitomo (POC). Fuente: (7)

Este proceso se caracteriza por un elevado rendimiento en la formación de óxido de propileno gracias a la alta eficacia del catalizador empleado y un consumo energético mucho menor que otros procesos en las etapas de separación y purificación del PO obtenido.

La primera tecnología comercializada que emplea este proceso pertenece al licenciario Sumitomo y fue puesta en marcha en el año 2003 en Japón (37). En el proceso POC de Sumitomo, se emplea un catalizador de óxido de silicio que contiene titanio para acelerar la epoxidación. En la etapa de oxidación, el cumeno es oxidado por aire, formándose hidroperóxido de cumeno. Dado que esta oxidación tiene lugar de forma inmediata, no es necesario ningún catalizador. Aquí, las condiciones de operación son temperaturas entre 90 – 130 °C y presiones manométricas en el intervalo de 0 - 1 MPa. El rendimiento para la formación de CMHP es elevado y presenta una selectividad para el compuesto de interés superior al 95%.

En la etapa de epoxidación se hace reaccionar el CMHP anteriormente formado con el propileno, obteniendo óxido de propileno y alcohol α -cumyl. Mediante el empleo de catalizadores con elevada eficacia para la reacción de epoxidación y un sistema no acuoso, la reacción de hidrólisis del óxido de propileno para formar glicoles de propileno se suprime. Así, es posible obtener una selectividad del PO alrededor del 95%. Mediante el empleo de cumeno como disolvente, que es inerte para el PO, contribuye a una mayor selectividad de PO.

Por último, tiene lugar la hidrogenación. Aquí es donde se obtiene cumeno a partir de hidrógeno y alcohol α -cumyl. Esta reacción normalmente tiene lugar en un reactor de lecho fijo, empaquetado con un catalizador, y se lleva a cabo suministrando una disolución de CMA/cumeno e hidrógeno. El CMA se convierte cuantitativamente a cumeno, el cual es recuperado por purificación: se separa del agua producida en la reacción de hidrogenación y se recircula el

cumeno a la etapa de oxidación. En la Figura 18, se muestra el diagrama de bloques de esta alternativa, donde es posible observar las distintas etapas de reacción, así como las de separación.

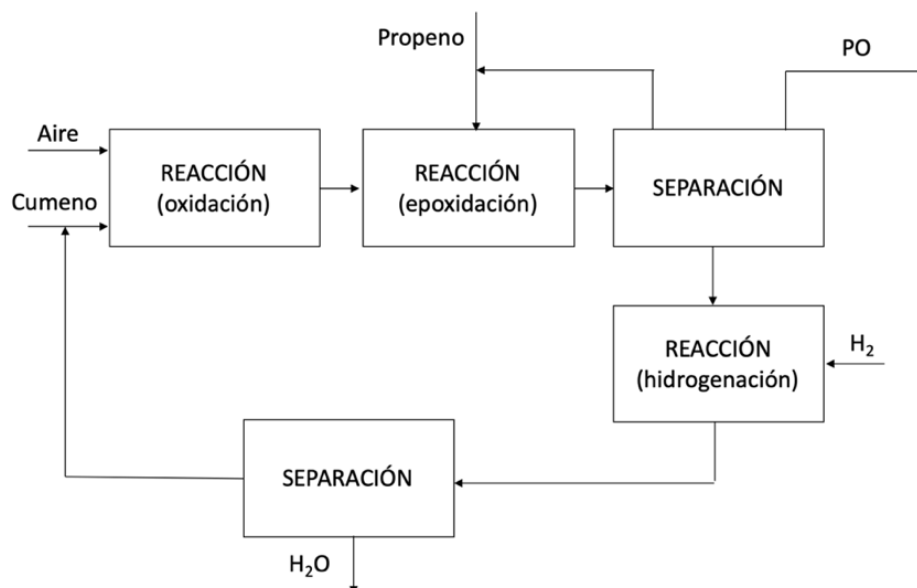


Figura 18. Diagrama de bloques del proceso POC de producción de PO. Fuente: elaboración propia a partir de (7).

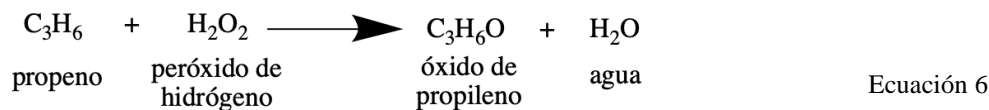
5.3.2. Proceso a partir de peróxido de hidrógeno (HPPO)

En el año 2009, las compañías BASF SE en colaboración con The Dow Chemical Co. y Evonik Degussa GmbH junto con Thyssenkrupp Industrial Solutions empezaron operaciones comerciales con la tecnología HPPO de forma independiente. Este proceso consiste en la producción PO a partir de propileno y peróxido de hidrógeno, haciendo uso de un catalizador de silicalita de titanio TS-1.

A lo largo de los años fueron estudiadas numerosas alternativas de agentes catalizadores para lograr llevar a cabo la reacción a partir de peróxido de hidrógeno. Diversos ácidos, tales como el fórmico, el acético y el propiónico han sido citados. Además, se analizaron múltiples metales: plata, boro, cobre, platino, silicio, titanio y estaño, por ejemplo (38). No obstante, no fue posible alcanzar altos rendimientos con ninguno, por lo que eran descartadas como rutas industriales.

El descubrimiento de la posibilidad de, mediante oxidación directa, conseguir un método sin coproducciones fue logrado en la década de 1980 por ENI, mediante el empleo de un catalizador heterogéneo de silicalita de titanio (TS-1). De esta forma fue posible conseguir la oxidación de propileno con peróxido de hidrógeno sin necesidad de agentes oxidantes adicionales (35), y es esta opción la que dio la oportunidad de desarrollar un proceso químico viable y rentable a gran escala. Por otro lado, hoy en día se están estudiando nuevas posibilidades relacionadas con catalizadores homogéneos de manganeso o de fosfato de tungsteno, sin embargo, estos no han

sido aplicados a nivel industrial (39). La reacción principal de este proceso se muestra a continuación:



Uno de los mayores atractivos de este proceso es su simplicidad para producir óxido de propileno empleando una reacción de epoxidación que tiene lugar en una sola etapa. Esta reacción produce exclusivamente como coproducto agua, la cual puede ser posteriormente tratada y descargada. De esta forma, se evitan los problemas relativos al tratamiento de subproductos clorinados y copiosas cantidades de aguas residuales que aparecen en el proceso de clorhidrina (40).

Empleando HPPO se consigue un proceso más rentable, especialmente considerando costes de inversión de capital más bajos. Es un método más respetuoso con el medioambiente, altamente eficiente y, como se mencionó previamente, su único coproducto es agua. Además, el consumo de materias primas (peróxido de hidrógeno y propileno) es bajo, dado que se obtienen altos rendimientos específicos de propeno (superiores al 95%).

En la Figura 19 se muestra el diagrama de bloques de esta alternativa correspondiente al proceso del licenciatario Evonik en colaboración con Thyssenkrupp. Este consiste en una etapa de reacción, otra de descompresión y separación de propileno, otra de purificación de PO, y, por último, la de separación metanol/agua. En el caso del proceso desarrollado por BASF y DOW, el diagrama de bloques es equivalente al de la Figura 19 con la supresión de la recirculación de propileno. Más adelante, se explicará detalladamente cada uno de los licenciarios de tecnologías, concretamente en el apartado de Selección del disolvente, en la página 38.

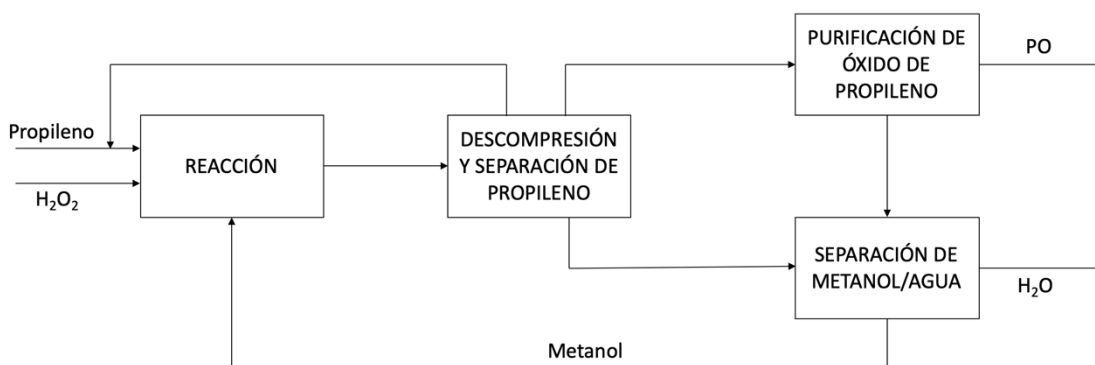


Figura 19. Diagrama de bloques del proceso HPPO de producción de PO. Fuente: elaboración propia a partir de (41)

Como puntos negativos, debe destacarse que la comercialización de este proceso de producción ha sido obstaculizada en gran medida por el suministro de peróxido de hidrógeno. Actualmente, el H_2O_2 es producido casi en su totalidad mediante el proceso de la antraquinona en grandes

plantas, donde los costes de producción son compensados por la producción a gran escala; los costes por transporte de este producto químico son demasiado elevados para producir óxido de propileno a granel. Por tanto, como solución a este problema, ha sido propuesta la integración del proceso de antraquinona para sintetizar peróxido de hidrógeno junto con el proceso de epoxidación para la producción de óxido de propileno (42).

5.4. Otros procesos en desarrollo

Además de los procesos descritos anteriormente, existen otros métodos de producción de óxido de propileno que están bajo desarrollo actualmente, por lo que aún no han sido aplicados a nivel industrial. Debido a esto no son considerados como alternativas factibles de fabricación de PO. Dichos procesos serán descritos brevemente a continuación para presentar una idea general de los avances tecnológicos en el sector y futuras opciones.

5.4.1. Proceso de HPPO mejorado

Para solventar los inconvenientes encontrados en el proceso de HPPO, tales como el rendimiento y la cantidad de energía requerida, varias compañías están llevando a cabo investigaciones de manera independiente.

Una de estas es Evonik Degussa GmbH, la cual construyó un proceso de reacción utilizando un catalizador homogéneo de un complejo de manganeso solubilizado en agua. Sin embargo, hasta ahora se habían presentado problemas relacionados con el bajo rendimiento de los productos de la epoxidación gracias a la alta descomposición del peróxido de hidrógeno en presencia de Mn.

El proceso propuesto por Evonik cuenta con un reactor de bucle y la epoxidación se realiza utilizando un sistema de dos fases, una acuosa y otra oleosa. El propósito de esta mejora es reducir la energía necesaria para la separación al no utilizar un disolvente como el metanol, además de mejorar el rendimiento de PO al controlar la descomposición de H_2O_2 y reacción progresiva al reducir el tiempo de contacto. No obstante, a pesar de ser una reacción a baja temperatura, el rendimiento de PO sigue sin ser del todo alto, pues no sobrepasa el 75%, y, además, el problema de descomposición del peróxido de hidrógeno aparentemente sigue persistiendo (7).

5.4.2. Proceso por oxidación directa

Este proceso está basado en la oxidación de propileno con aire en fase gaseosa. Este sistema es el empleado en la actualidad para la producción de óxido de etileno. En lo que respecta al consumo de energía, este es el proceso ideal para producir PO, sin embargo, resulta complicado controlar las reacciones de combustión acompañadas por la deshidrogenación de grupos de metilo alílicos del propileno. Es por esto por lo que sigue siendo un desafío el desarrollo de este método a nivel industrial (7).

5.5. Alternativa seleccionada

A modo de resumen, se puede establecer que los distintos procesos de obtención de óxido de propileno se diferencian entre ellos en el compuesto que transforma el propeno en óxido de propileno.

De acuerdo con el ámbito legislativo, es posible determinar cuál es la mejor alternativa para la producción de óxido de propileno. La Decisión 2017/2117 del 21 de noviembre de 2017, implementada por la Comisión Europea, bajo la Directiva 2010/75/EU del Parlamento Europeo y del Consejo sobre emisiones industriales, establece los documentos BREFs (Best available techniques Reference documents) para la producción de compuestos químicos orgánicos de grandes volúmenes, de los que se extraen las conclusiones de las Mejores Técnicas Disponibles (MTD). Estas afectan la instalación en cuestión, y en ellas se indican las prácticas más adecuadas para la fabricación del producto en cuestión (PO).

El método más tradicional de obtención del PO es el de clorhidrina. Los BREF establecen que este es el proceso que tiene la mayor huella medioambiental, debido al alto uso de electricidad para generar cloruros. Además, gracias al hecho de que por cada tonelada de PO fabricada se producen aproximadamente 40 de agua residual (salmuera) y 2 de sales de cloro. El agua de este proceso es muy difícil de purificar, especialmente en lo concerniente a retirarle todos los hidrocarburos remanentes. Asimismo, los compuestos generados aparte del PO tienen poco, o ningún valor comercial, y, aunado a esto, reducen la productividad del sistema, lo que los convierte en residuos no deseados. Por todos estos puntos negativos, este proceso ha ido en descenso a nivel mundial a medida que se han desarrollado alternativas más eficientes, y, por lo tanto, es descartado para la planta en cuestión.

En lo relativo a los procesos de segunda generación, en concreto, a las rutas de coproducción con estireno y alcohol terbutílico, estas tienen la característica de ser rentables en el ámbito económico cuando ambos productos tienen una alta demanda en el mercado. No obstante, al ser generada de 2 a 4 veces más cantidad de coproducto que de óxido de propileno, y tener dos mercados distintos y desligados entre sí a los que satisfacer, es muy probable que en algún momento se desbalancen las demandas de las dos sustancias, lo cual genera una situación inestable y de incertidumbre de cara al futuro. Esto se considera una gran desventaja con respecto a los procesos en los que el PO es producido de manera independiente y, de esta manera, no se consideran alternativas adecuadas para el proceso que se diseñará.

Al igual que el de HPPO, el proceso de producción de óxido de propileno a partir de cumeno destaca por producir exclusivamente PO. De esta forma, se evita depender de la demanda de mercado de otros posibles coproductos. Comparando este proceso con el PO/SM, es posible destacar la mayor estabilidad que presenta el cumeno respecto al estireno y la ausencia de

coproductos. Además, presenta menor impacto ambiental y consumo energético que los procesos de generaciones previas (36), (7). Sin embargo, un inconveniente fundamental que se debe destacar es que es una tecnología puesta en marcha a nivel industrial muy recientemente, y es por esto por lo que, al no haber suficiente información disponible hoy en día para el desarrollo de un proyecto como el presente, la alternativa de POC se descarta.

Por otro lado, el proceso HPPO es la alternativa elegida para el diseño de la planta de producción de óxido de propileno en cuestión, debido a numerosos factores favorables correspondientes a dicho método, los cuales serán detallados a continuación.

Este implica importantes beneficios medioambientales. En los BREF se menciona una reducción del 70 – 80% del agua residual generada, y un 35% menos de consumo energético en comparación con las demás tecnologías existentes de producción industrial de PO. Además, se reduce la infraestructura necesaria y el impacto físico, por el hecho de integrar el uso de las materias primas empleadas y la ausencia de coproductos. Así, esta ruta puede ser considerada como la de menor impacto medioambiental. Sin embargo, en este documento se menciona que, debido a la existencia hoy en día de una sola planta que emplee este proceso en territorio europeo, no se realizan mayores consideraciones y, por tanto, no se mencionan mejores técnicas disponibles.

No obstante, un aspecto importante a considerar es el hecho de que la viabilidad económica de este proceso podría estar vinculada a la integración en las plantas de HPPO con la producción de peróxido de hidrógeno, debido a su alto precio de venta y traslado a nivel industrial.

Resumidamente, es posible enumerar las siguientes ventajas del empleo del proceso HPPO, las cuales llevaron a su selección como mejor alternativa posible para la producción de óxido de propileno:

- Alto rendimiento específico en la producción de PO.
- Libre de coproductos, independencia de la demanda de mercado de otros productos.
- Larga vida del catalizador gracias a las suaves condiciones de operación en el reactor.
- Elevado rendimiento del catalizador TS-1.
- Opuestamente al método de la clorhidrina, el proceso HPPO ofrece una producción respetuosa con el medioambiente, debido al ciclo totalmente cerrado de disolvente y alimentación y la ausencia de cloro.
- En comparación con otras tecnologías de vanguardia ofrece bajos costes de inversión y consumo energético.
- Oportunidad de optimizar el balance energético de la planta en conjunto mediante el uso de tratamientos anaeróbicos del agua residual (estimación de producción aproximada de 20 kg de vapor a 20 barg por tonelada de PO obtenida).

Todas las ventajas que ofrece esta alternativa son responsables de que, desde la implantación de las primeras plantas de HPPO en 2009, esta tecnología esté sustituyendo al método tradicional de producción de óxido de propileno (el de la clorhidrina). La evolución se muestra en la Figura 20.

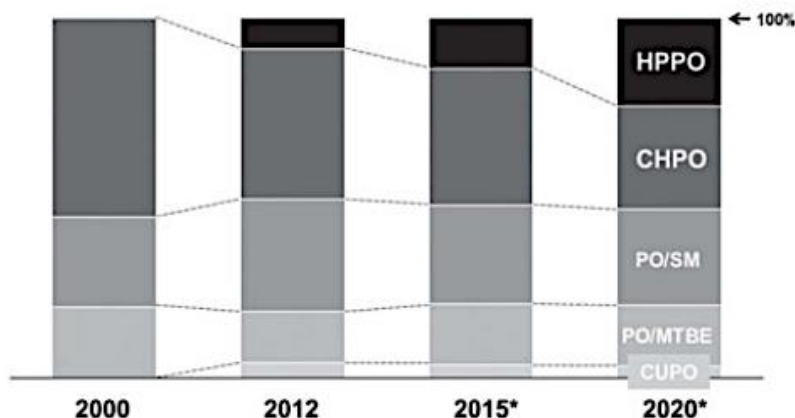


Figura 20. Evolución de las tecnologías de PO. Fuente: (35)

En la Tabla 7 se muestra un breve resumen de las ventajas y desventajas que presentan cada una de las alternativas anteriormente mencionadas.

Tabla 7. Resumen de las ventajas y desventajas de las alternativas de producción de PO. Fuente: elaboración propia.

	Ventajas	Desventajas
Clorhidrina	<ul style="list-style-type: none"> • Posibilidad de integrar plantas de producción de cloro 	<ul style="list-style-type: none"> • Gran consumo energético • Elevada generación de aguas residuales • Bajo valor comercial de los subproductos
PO/SM; PO/TBA	<ul style="list-style-type: none"> • Menor generación de residuos que la clorhidrina 	<ul style="list-style-type: none"> • Gran cantidad de coproductos • Dependencia del mercado de coproductos
POC	<ul style="list-style-type: none"> • Respetuoso con el medioambiente • Independencia del mercado de coproductos 	<ul style="list-style-type: none"> • Muy novedoso, poca información disponible
HPPO	<ul style="list-style-type: none"> • Respetuoso con el medioambiente • Independencia del mercado de coproductos 	<ul style="list-style-type: none"> • Alto precio del peróxido de hidrógeno.
HPPO mejorado	<ul style="list-style-type: none"> • Menor consumo energético y mayor rendimiento que HPPO 	<ul style="list-style-type: none"> • En fase de desarrollo
Oxidación directa	<ul style="list-style-type: none"> • Muy bajo consumo energético 	<ul style="list-style-type: none"> • En fase de desarrollo

5.6. Selección del disolvente

La reacción de epoxidación de propeno depende estrictamente del medio en el que se lleva a cabo dicha reacción. Esta se desarrolla en presencia de un disolvente. Es necesaria la presencia de un grupo -OH en la producción de óxido de propileno.

Bibliografías (43) demuestran que utilizar el alcohol más sencillo, el metanol, resulta en la actividad más alta para la epoxidación. Además, con el metanol no solo se consiguen mayores conversiones, sino también una selectividad aumentada hacia el PO.

En la Figura 21 se ilustran los resultados de estudios realizados comparando distintos disolventes para la reacción en cuanto a la conversión de peróxido de hidrógeno y la selectividad hacia PO (44). En esta se evidencia que el metanol es el mejor disolvente para el proceso HPPO y, por ende, será el empleado en el proceso a diseñar.

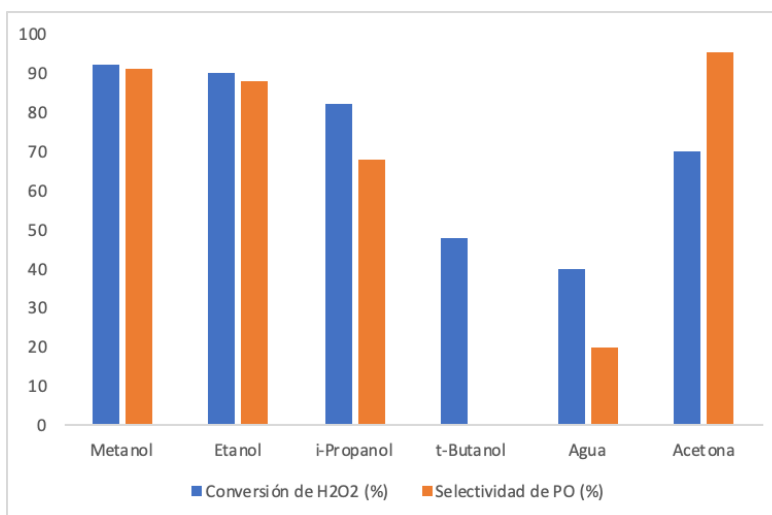


Figura 21. Influencia del medio de reacción en la epoxidación del propeno. Fuente: elaboración propia a partir de (44).

5.7. Selección del catalizador

El catalizador TS-1 abrió la posibilidad del empleo de peróxido de hidrógeno como agente oxidante, permitiendo su uso como una disolución acuosa sin producirse la desactivación del catalizador. Mediante el empleo de este catalizador, la reacción principal del proceso es llevada a cabo en condiciones suaves de temperatura, en torno a 50 °C, consiguiendo como subproducto únicamente agua (44). Debido a la inexistencia de catalizadores hoy en día que proporcionen mejores resultados que la silicalita de titanio, las plantas de HPPO en marcha utilizan TS-1. Por consiguiente, este se selecciona como catalizador del proceso.

5.8. Licenciarios de tecnologías del proceso HPPO

Como fue mencionado previamente, existen dos licenciarios de tecnologías basados en la alternativa escogida, el proceso HPPO: BASF SE en colaboración con The Dow Chemical Co. y

Evonik Degussa GmbH junto con Thyssenkrupp Industrial Solutions. A continuación, se explicarán los rasgos generales más destacables de cada una de las tecnologías.

BASF y DOW patentaron un proceso donde el óxido de propileno se forma en un reactor de elevada eficiencia del tipo intercambiador de calor, alcanzándose conversiones de peróxido de hidrógeno en torno al 99,8% y una selectividad a óxido de propileno del 93,2%. Este tipo de plantas se emplean para la producción de PO desde 2008, año en el que se puso en marcha la planta de Antwerp, en Bélgica. En la Figura 22 es posible observar un esquema de esta tecnología.

Se emplea un reactor tubular que trabaja prácticamente a conversión completa. La sección de purificación se compone principalmente de cinco columnas de destilación en serie para así eliminar primero el *off-gas* (columna 1), a continuación, purificar el óxido de propileno (columnas 2 y 5), separar el agua y el glicol (columna 3) y, por último, reciclar el metanol (columna 4). Con el objetivo de obtener una mejor separación del óxido de propileno, BASF y DOW han patentado una columna de destilación extractiva que emplea agua o glicol como disolvente.

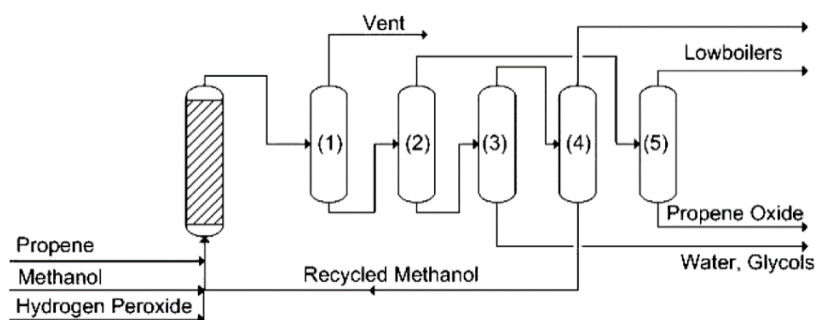


Figura 22. Esquema del proceso HPPO del licenciatario BASF SE – The Dow Chemical Co. Fuente: (44)

Por otro lado, en la tecnología creada por Evonik Degussa GmbH junto con Thyssenkrupp Industrial Solutions, cuyo esquema puede verse en la Figura 23, la etapa de reacción tiene lugar en una mezcla metanol/agua. El propileno y el peróxido de hidrógeno reaccionan para formar PO (Ecuación 6) en un reactor de lecho fijo empleando un catalizador de silicalita de titanio TS-1. El proceso, altamente exotérmico, tiene lugar bajo condiciones relativamente suaves: temperaturas inferiores a 100°C para así evitar la formación de subproductos indeseados y presión en torno a 30 bar. Es posible llegar a obtener una selectividad de PO superior al 95%.

El calor producido por la exotermidad de la epoxidación se elimina por un sistema integrado de enfriamiento. Tras la reacción, la mezcla del producto, que contiene mayoritariamente metanol, agua, propileno y PO, es despresurizada. De esta forma se obtiene una corriente en fase gas rica en propeno y otra en fase líquida. La corriente en fase gaseosa se comprime, condensa y se hace recircular a la sección de reacción. Además, se obtiene un *off-gas*, formado por compuestos inertes

y pequeñas cantidades de oxígeno procedente de la descomposición de peróxido de hidrógeno. Esta corriente es enviada a los límites de batería del proceso.

Por otro lado, el líquido despresurizado obtenido anteriormente se transfiere a la sección de preseparación, donde el PO y el propileno disuelto son separados del metanol y el agua. Una columna de destilación elimina los restantes hidrocarburos de C₃ que quedan en la mezcla PO/metanol. El destilado de PO es purificado en la columna de PO y los restos de metanol y agua, así como pequeñas cantidades de impurezas, salen por la parte inferior (producto de colas).

Por último, la mezcla metanol/agua obtenida por colas de la columna de preseparación y de la columna de PO, es enviada a una columna de destilación. De esta forma se obtiene una corriente de metanol que sale por cabezas y es devuelta a la sección de reacción. El producto por colas de esta columna, que contiene principalmente agua y pequeñas trazas de subproductos con alto punto de ebullición, es enviado a los límites de batería del proceso.

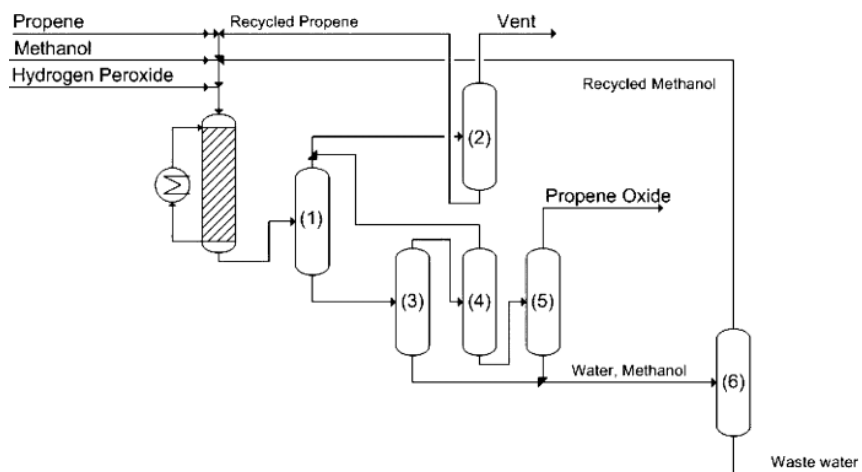


Figura 23. Esquema del proceso HPPO del licenciatario Evonik Degussa GmbH-Thyssenkrupp Industrial Solutions. Fuente: (44)

Finalmente, ya que ambos licenciatarios ofrecen alternativas muy similares, se selecciona como base para la realización de esta planta química la tecnología cuya información relacionada con el proceso sea más accesible y completa para llevar a cabo el proyecto, siendo este el caso de la tecnología Evonik-Uhde, por lo que es la opción escogida.

6. LOCALIZACIÓN

Un nuevo proyecto requiere encontrar un territorio adecuado y una planificación de la distribución del lugar y del equipo. A la hora de seleccionar el emplazamiento de las instalaciones, deben ser considerados los factores primarios: suministro de los materiales necesarios, mercados, clima y acceso a combustibles, energía y agua. Además, también hay que tener en cuenta factores específicos, tales como transporte, legislación, impuestos, características del suelo, mano de obra,

entre otros. A continuación, se procederá a la selección y justificación de la ubicación seleccionada para la Planta de Producción de Óxido de Propileno.

En primer lugar, se selecciona localizar las instalaciones de la planta de HPPO en España. El principal motivo se basa en el estudio de mercado realizado previamente, donde se concluye que este país es principalmente importador de óxido de propileno. Esto se debe a que la cantidad de este producto químico producida a nivel nacional no es suficiente para el abastecimiento de las empresas españolas que necesitan óxido de propileno para fabricar los correspondientes derivados. Adicionalmente, se espera un aumento a nivel global de la demanda de PO, por lo que la exportación también sería una oportunidad de mercado, teniendo España una ubicación estratégica a nivel internacional, y, en específico, europeo.

Se ha decidido emplazar la Planta de Producción de Óxido de Propileno a partir de peróxido de hidrógeno en el Polígono Industrial Empresarium, ubicado en el municipio de Zaragoza, capital autonómica y de la provincia homónima. Con una extensión de 969 kilómetros cuadrados, esta ciudad contaba en 2019 con una población de 674997 personas, según la revisión del padrón municipal a 1 de enero (45). Como núcleo urbano más importante destaca la misma ciudad de Zaragoza, considerada una de las ciudades más importantes de España, tanto a nivel habitacional como económico.

Tres provincias conforman la Comunidad Autónoma de Aragón: Huesca, Zaragoza y Teruel, tal y como se observa en la Figura 24. Se trata de una comunidad ubicada en el noreste de la península ibérica. Limita al norte con Francia, al sur con la Comunidad Valenciana y Castilla-La Mancha, por el este con Cataluña y por el oeste con Navarra y Castilla y León.



Figura 24. Mapa Comunidad Autónoma de Aragón. Fuente: elaboración propia a partir de (46)

6.1. Suministro de materiales de partida

Con respecto a la distribución de los materiales necesarios para llevar a cabo la producción de PO, como fue expuesto en el Análisis de Mercado, dos de las empresas productoras de peróxido de hidrógeno se encuentran en La Zaida, Zaragoza y en Sabiñánigo, Huesca. Estas se localizan a 50 y 130 kilómetros de distancia del polígono Empresarium, respectivamente. Relativo al propileno este es producido en la refinería de Repsol en Tarragona y en Petronor, con una capacidad de 380 kt/año y 80 kt/año respectivamente. También existe una planta de producción de propileno en Castellón.

En la Figura 25 se muestra la localización del emplazamiento seleccionado (en rojo) y los distintos puntos donde se producen las materias primas (las plantas productoras de peróxido de hidrógeno de color azul y las refinerías donde se obtiene propileno de verde). Así, es posible observar como la localización elegida para la Planta, en el Noreste peninsular, es enclave estratégico debido a que se encuentra en un punto céntrico de las distintas instalaciones donde se manufacturan las materias primas necesarias.



Figura 25. Ubicación de la Planta y localización de las materias primas. Fuente: elaboración propia a partir de *Google Maps*.

6.2. Proximidad a mercados de consumo

Asimismo, es de vital importancia que una industria se encuentre localizada a una distancia próxima de sus clientes potenciales. De esta manera, sabiendo que el principal uso del PO es para la producción de poliuretano, y que, a su vez, el mercado español es liderado por empresas ubicadas en la región catalana (fundamentalmente en Tarragona y Barcelona), se determina correcta la ubicación de la planta en Zaragoza, a menos de 300 km de cualquiera de las dos ciudades mencionadas. Además, se sitúa a una distancia próxima de la capital, Madrid, de

ciudades importantes como Bilbao y Valencia, sin olvidar su proximidad con Francia, hecho que permite una conexión con el resto del país y Europa, y, por ende, mayores oportunidades de negocio.

6.3. Medios de transporte y comunicación

Se puede acceder a Zaragoza en automóvil, autobús, ferrocarril y avión. Se localiza próxima a puertos importantes. Es además la puerta de salida hacia Europa a través del Túnel del Somport.

Zaragoza cuenta con un aeropuerto propio, el cual, gracias a su situación geográfica privilegiada, es un importante centro de pasajeros y carga, comunicando la ciudad con múltiples destinos a través de distintas líneas aéreas.

Al mismo tiempo, en la ciudad de Zaragoza se encuentran diversas estaciones de ferrocarril, siendo la más relevante la Estación Intermodal Zaragoza Delicias, la cual es tanto una estación de trenes como de autobuses, y pertenece a la red de trenes de Alta Velocidad (AVE) (47).

Algunos de los puertos más importantes del país, como lo son los de Barcelona, Tarragona y Bilbao, se encuentran a menos de 300 kilómetros de distancia de Zaragoza. Además, a pesar de ser una ciudad sin costa, esta dispone de una terminal marítima (tmZ), denominada en ocasiones como un puerto seco, y especializada en mercancía contenerizada, tanto para carga general como para mercancías bajo control de temperatura. Tiene un área operativa con más de 100000 m² de superficie y posibilidad de ampliación, con una capacidad de almacenaje de más de 4000 contenedores (48). En la Figura 26 se presenta una perspectiva de las principales conexiones de dicha terminal con el resto de España y con parte de Francia.



Figura 26. Ubicación de la terminal marítima de Zaragoza y principales conexiones. Fuente: (48)

En cuanto a las conexiones por carretera, Zaragoza está situada en un cruce de varias carreteras. Se conecta con Barcelona y Bilbao por las autopistas AP-2 y AP-68 respectivamente. Asimismo, tiene comunicación con ciudades como Madrid, Huesca, Teruel y Valencia mediante las autovías A-2 y A-23. Cuenta también con una red de carreteras nacionales, tales como la N-II Madrid-Zaragoza-Barcelona, la N-330 Levante a Francia por Zaragoza y la N-232 Santander-Logroño-Zaragoza-Vinaroz (47).

A continuación, en la Figura 27 se presenta un mapa de las conexiones terrestres de la ciudad y sus alrededores. Finalmente, la carretera provincial CV-624 conecta directamente con el Polígono Empresarium y será la empleada en el último tramo de transporte para llegar a las instalaciones.

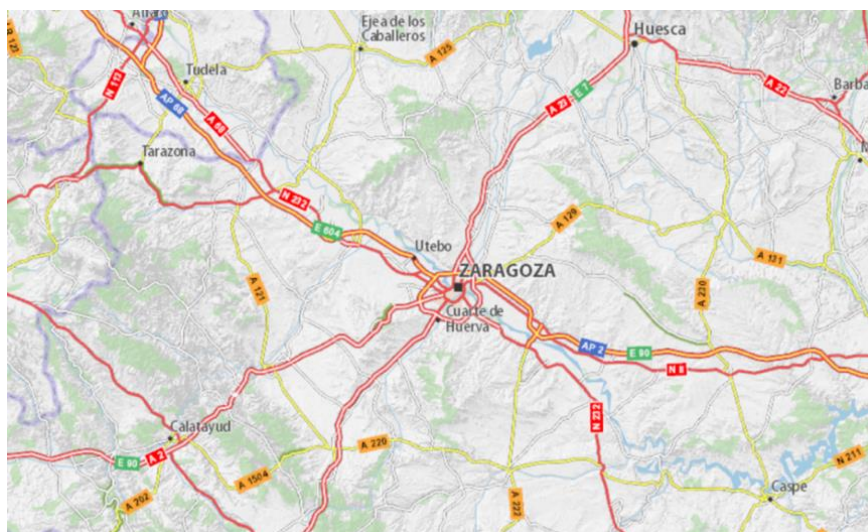


Figura 27. Mapa de carreteras de Zaragoza y cercanías. Fuente: (49)

6.4. Disponibilidad de mano de obra

Otro aspecto fundamental para el emplazamiento de una nueva planta industrial química es la disponibilidad de mano de obra capacitada. Según datos estadísticos, Aragón contaba a último día de enero de 2020 con un paro registrado de 67635 personas (50). Considerando esto, es posible determinar que se cuenta con la posibilidad de contratar y entrenar el personal requerido para la empresa. Conjuntamente, en Zaragoza se encuentra una universidad pública, de la cual egresan profesionales con diversas especializaciones, las cuales son requeridas para hacer funcionar cualquier planta, por lo que se podría contar también con personal cualificado universitario para el desarrollo de la industria.

6.5. Características del polígono industrial seleccionado

6.5.1. Superficie disponible e infraestructura

El Polígono Empresarium, en Zaragoza, cuenta con una superficie total de 3497784 m², de la cual 1610430 m² están destinados a parcelas. Hoy en día, se encuentra ocupado el 90% del terreno.

Adicionalmente, hay disponibilidad de 4000000 m² de superficie sin urbanizar que puede ser utilizada para futuras ampliaciones.

Hay un total de 141 parcelas, siendo 9 las libres actualmente. El precio medio de venta por parcela es de 100 €/m². La altura máxima por nave es de 10,5 m, con posibilidad de ampliación si está debidamente justificada. El Polígono cuenta con red contra incendios, iluminación y está asfaltado con Asfalto D-8 (51).

En la Figura 28, es posible observar la distribución de los espacios en el Polígono Industrial Empresarium. La mayoría del espacio se dedica a uso industrial. Existen también amplias zonas verdes y forestales. Aparece señalada con una equis la parcela elegida para la ubicación de las instalaciones de la Planta de PO.

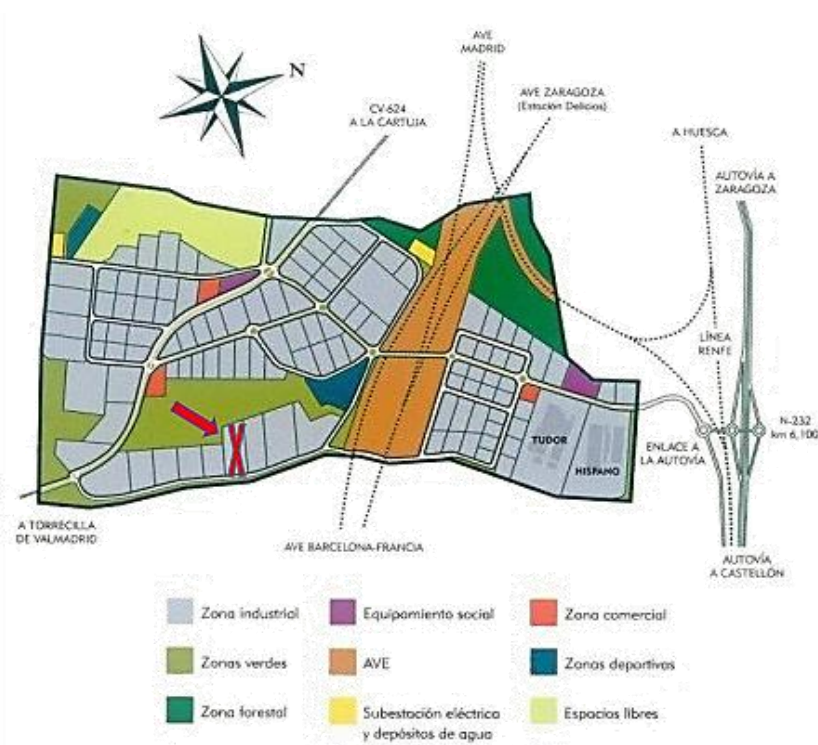


Figura 28. Plano del Polígono Industrial Empresarium. Fuente: (51)

El terreno seleccionado se encuentra en el Sector 88-1, manzana 6 y parcela 6 y cuenta con una superficie de 27511 m². La referencia catastral del inmueble es: 1853915XM8015D0001IY (52). Actualmente esta parcela se encuentra libre y cuenta con otras parcelas anexionadas también disponibles en caso de necesitar futuras ampliaciones de la Planta de PO.



Figura 29. Vista aérea de la parcela seleccionada. Fuente: elaborado a partir de Google Maps

6.5.2. Servicios

Existe abastecimiento de agua potable procedente de la Red Municipal Zaragoza Ramal Cartuja. Hay un depósito de agua con capacidad de 5000 m³, con un caudal máximo de 1440 m³/h. El agua proporcionada tiene un pH de 7,4.

Asimismo, el polígono cuenta con suministro energético de gas de alta y media presión. Existe una red eléctrica con suministro de alta y baja tensión y con una potencia eléctrica de 60000 W, ampliable a 90 MW. Las líneas poseen un voltaje 400/230 V. Además, se cuenta con una subestación eléctrica de transformación de 220/45 kV y 45/15 kV.

Los vertidos son enviados a una red de saneamiento con canon de vertido. Las aguas residuales llegan a la EDAR La Cartuja, donde son depuradas por oxidación total (51).

6.5.3. Climatología

Es de gran importancia, asimismo, el conocimiento del clima del lugar donde se decida el emplazamiento de la Planta. Para el análisis de este apartado se emplean los datos proporcionados en los tres últimos años (del 1 enero de 2017 al 1 de enero de 2020) por la estación meteorológica Zaragoza-Aeropuerto, al encontrarse próxima al punto donde se ha decidido ubicar la instalación.

En la Figura 30 se observan las temperaturas máximas y mínimas alcanzadas en el período de estudio. La temperatura máxima media se sitúa sobre los 25°C mientras que la mínima alrededor de los 10°C. Como valor máximo, en agosto del verano de 2019 se alcanzaron 43,2°C y como valor mínimo, -4,9°C en enero de ese mismo año.

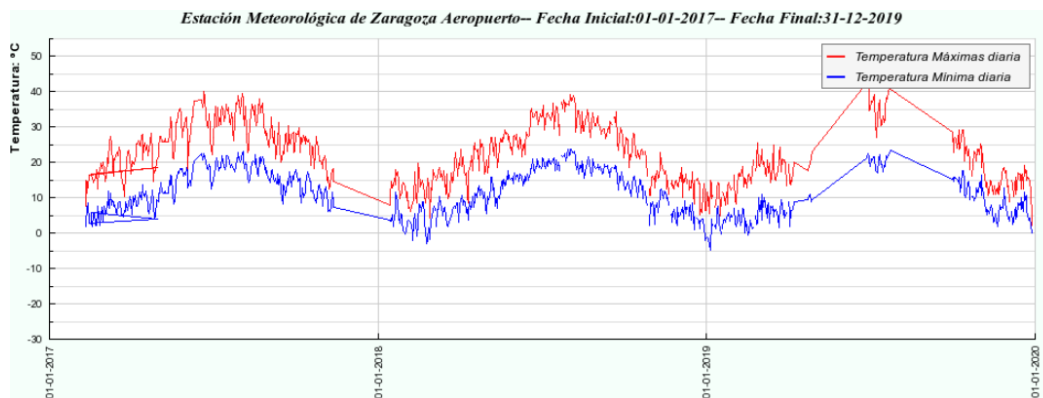


Figura 30. Temperaturas máximas y mínimas en la estación Zaragoza-Aeropuerto. Fuente: (53)

Relativo a las precipitaciones, estas no son especialmente abundantes ni frecuentes en la zona, como se muestra en la Figura 31. En días con lluvia se alcanza una media de 15 L/m² y muy ocasionalmente son superados los 30 L/m².



Figura 31. Precipitaciones diarias en la estación meteorológico Zaragoza-Aeropuerto. Fuente: (53)

Por último, en lo referente al viento, durante el período de estudio se llegó a alcanzar una velocidad de rachas de viento de 135 km/h. Sin embargo, la media diaria se sitúa en 21 km/h. En la Figura 32 es posible observar el histórico de datos de velocidad del viento en la estación meteorológica Zaragoza-Aeropuerto desde el año 2007.

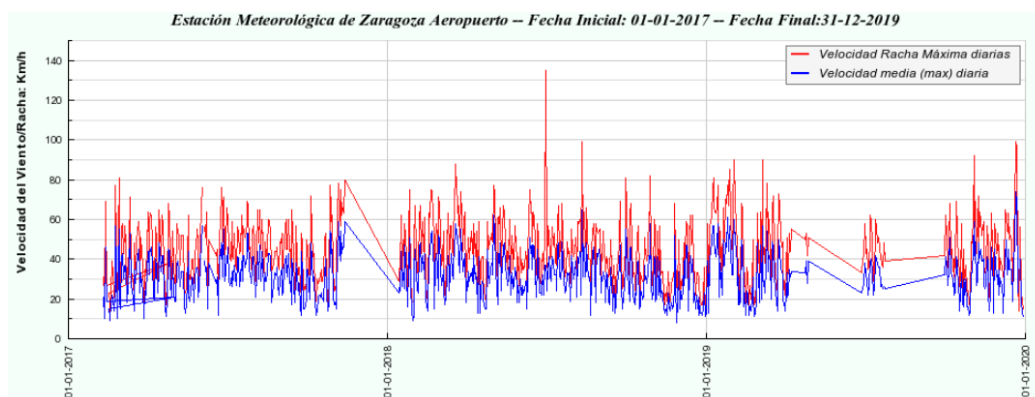


Figura 32. Viento en la estación meteorológica de Zaragoza-Aeropuerto. Fuente: (53)

Del análisis realizado previamente es posible extraer como conclusión que en el entorno de Zaragoza no se dan condiciones meteorológicas adversas y, por consiguiente, no existe ninguna razón en lo referente al clima que cuestione la decisión del emplazamiento de la Planta de Producción de Óxido de Propileno en el Polígono Empresarium.

6.5.4. Sismicidad

A la hora de seleccionar la ubicación de la Planta de PO, es importante considerar la actividad sísmica que presenta el lugar. En la Figura 33 se observa la peligrosidad sísmica existente en el territorio español. La zona sur de la Península Ibérica, así como a lo largo de los Pirineos y la costa catalana están expuestas a terremotos con mayor intensidad. Así, en la provincia de Zaragoza, donde se decidió ubicar las instalaciones del proyecto, la peligrosidad es muy baja y, por tanto, no es considerada un inconveniente para el emplazamiento seleccionado.



Figura 33. Mapa de peligro por sismicidad en el Estado Español. Fuente: (54)

6.6. Impacto ambiental

Considerando que la alternativa seleccionada de producción de óxido de propileno solo origina agua como coproducto, la principal gestión ambiental del proceso tiene relación directa con el tratamiento de este recurso. Asimismo, dicho proceso no genera emisiones contaminantes significativas a la atmósfera.

Por otro lado, en las zonas aledañas al polígono no se localiza ningún conjunto residencial ni zonas de alta concentración de personas. De esta manera es posible indicar que no se pondría en riesgo a la población en caso de algún vertido o emisión accidental.

6.7. Consideraciones políticas y estratégicas

Actualmente, la despoblación es uno de los mayores problemas a los que se enfrenta la Comunidad Autónoma de Aragón. En la lucha contra la despoblación es importante no solo buscar una calidad de vida en cuanto a servicios sanitarios, educativos y culturales, sino también la generación de actividad económica.

Así, la puesta en marcha de una planta industrial, sin duda aportará riqueza a las distintas comarcas de la provincia zaragozana por la generación de empleos, tanto directos como indirectos. Esto representa un modo de mantener la población y, al mismo tiempo, atraer nuevos habitantes (55).

Además, desde el Gobierno de Aragón se ofrecen ayudas a la industria y la Pequeña y Mediana Empresa (PYME), procedentes del Programa Operativo Fondo Europeo de Desarrollo Regional de Aragón 2014-2020, dirigidas al impulso de la competitividad de las empresas industriales (56).

7. ESTUDIO DE VIABILIDAD TÉCNICA

Realizar un estudio de viabilidad técnica es clave a la hora de conocer si es posible desarrollar de manera eficiente el presente proyecto. A continuación, se realizará un análisis de las diferentes condiciones necesarias para el funcionamiento de la Planta de PO ubicada en el Polígono Industrial Empresarium: se estudiará la viabilidad tecnológica, así como los recursos disponibles, factores externos involucrados, seguridad y, por último, un análisis de costes.

7.1. Viabilidad tecnológica

En el apartado de estudio de alternativas se comentaron las distintas vías de producción de óxido de propileno. Cada una se analizó y se fueron descartando por diferentes motivos hasta concluir que, actualmente, la más ventajosa es la alternativa de HPPO. El método de producción de óxido de propileno a partir de peróxido de hidrógeno fue, por ende, el seleccionado para la realización de este proyecto. Existen dos licenciarios de tecnologías para HPPO: BASF SE–The Dow Chemical Co. y Evonik Degussa–GmbH–Thyssenkrupp Industrial Solutions. Debido a que este último proporciona información más detallada del proceso, es el seleccionado como proveedor tecnológico del proyecto.

Desde 2008 la tecnología Evonik-Uhde HPPO ha sido exitosa en la comercialización de su operación en la primera planta a nivel mundial basada en este proceso, propiedad de SKC de Corea del Sur. Además, también será la tecnología empleada en la planta húngara que iniciará su operación en 2021. Asimismo, las diferentes investigaciones acerca del proceso HPPO muestran al catalizador de silicalita de titanio, TS-1, como el óptimo, dado que con él es posible conseguir una selectividad superior al 95%. En este proceso se emplea un reactor tubular de lecho fijo pues proporciona el mejor balance entre conversión de peróxido de hidrógeno y selectividad de óxido de propileno. Además, el disolvente seleccionado para la epoxidación del propileno tiene un gran

impacto en la velocidad de reacción. Se selecciona el metanol debido a que este disolvente proporciona la mayor actividad para la epoxidación (35).

Por último, es importante mencionar las ventajas medioambientales y económicas que este proceso presenta: reducción del agua residual generada, menor consumo energético e independencia del mercado de coproductos.

7.2. Recursos disponibles

Es de importante relevancia el conocimiento de todos los recursos disponibles de la empresa, así como verificar si son apropiados y suficientes para sostener el proyecto hasta su fin.

7.2.1. Equipos

Todos los equipos requeridos en el proceso son habituales en la industria química. Estos son bombas, compresores, intercambiadores de calor y equipos de separación y reacción. En este caso, para la planta en cuestión, en principio, dichos equipos no presentan requerimientos de alguna característica particular que impida adquirir unidades comercialmente estandarizadas. Por lo tanto, se deduce que su adquisición no será especialmente problemática y que se dispone de la suficiente variedad y disponibilidad en el mercado.

7.2.2. Utilidades

Como fue indicado en el apartado de localización, en el polígono industrial se cuenta con todos los servicios auxiliares requeridos para la planta. Se dispone de suministro de agua potable, electricidad y gas de media y alta presión. Asimismo, será posible llevar a cabo el tratamiento de efluentes líquidos en una estación depuradora de aguas residuales localizada en las proximidades de la parcela. El agua de enfriamiento requerida para los procesos de intercambio de calor puede ser suministrada desde el río Ebro, localizado a escasos kilómetros del polígono. Por otra parte, en caso de ser necesario, sería posible la instalación de torres de enfriamiento para recobrar la temperatura inicial del agua. Igualmente, el vapor de proceso empleado para procesos de intercambio de calor se podrá generar en calderas y equipos auxiliares disponibles en planta.

7.2.3. Materiales de partida y producto

Una vez más, a partir del estudio de mercado elaborado y de la localización escogida para la planta de óxido de propileno, es posible afirmar que se contará con la disponibilidad necesaria de los materiales requeridos, propileno y peróxido de hidrógeno, por parte de las plantas productoras cercanas a Zaragoza, o, en su defecto, de aquellas más alejadas ubicadas en otros países europeos.

Del mismo modo, con respecto a la posibilidad de mercado del producto, se ha determinado que existe suficiente demanda de óxido de propileno en España, pues, en la actualidad, este es un país mayormente importador de este bien. Los productos derivados del PO se encuentran en ascenso debido a su gran variedad y versatilidad. En España se encuentran múltiples industrias que

emplean el óxido de propileno como material de partida, y gracias a la cercanía con Francia es posible también distribuir hacia el mercado europeo.

7.2.4. Acceso a las zonas de producción

Es importante considerar, como se explicó en el apartado de localización, una buena comunicación de la Planta de PO tanto para la llegada de los productos de partida del proceso, como para la distribución del óxido de propileno manufacturado. Por el emplazamiento en el Polígono Empresarium, es elemental la comunicación por carretera.

En España, lo relativo al transporte nacional de mercancías peligrosas se realiza en base al ADR, según la Directiva 2008/68/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de septiembre de 2008, sobre el transporte terrestre de mercancías peligrosas. El ADR se refiere al “Acuerdo Europeo sobre Transporte Internacional de Mercancías Peligrosas por Carretera” (57).

Asimismo, por la naturaleza de la Planta, esta ha de situarse en un entorno alejado de centros urbanos, pero, al mismo tiempo, de fácil acceso para los trabajadores.

7.2.5. Mano de obra

Tal y como se mencionó en la justificación de la localización, en Aragón es posible cursar estudios universitarios en distintos centros. En concreto, la Universidad de Zaragoza, institución pública, es el elemento central del sistema universitario aragonés y posee campus localizados en Zaragoza, Huesca y Teruel. Entre la oferta de titulaciones de esta universidad, cabe destacar el Grado en Ingeniería Química, impartido en el Campus Río Ebro y que habilita para ejercer la profesión de Ingeniero Técnico Industrial. Asimismo, también es impartido el Máster Universitario en Ingeniería Química (58) (59). De esta forma, es posible concluir la existencia de una sólida formación en el ámbito de la ingeniería química en el entorno zaragozano que proporcionará profesionales competentes en este campo necesarios para el funcionamiento de la Planta de producción de óxido de propileno.

7.3. Factores externos

Es importante considerar los diferentes factores externos a los que puede verse expuesta la Planta de PO y puedan afectar al desarrollo eficiente del proyecto. Por consiguiente, se realizó previamente un análisis de la localización geográfica seleccionada, llegando a la conclusión de que las condiciones son favorables para la instalación industrial. También deben tenerse en cuenta las diferentes normativas legales o políticas que puedan existir y obstaculicen la ejecución del proyecto. Así, es posible concluir que los factores externos considerados propician un desarrollo óptimo del proceso.

7.4. Seguridad del proceso

Todo proceso químico es por naturaleza peligroso y, por consiguiente, la seguridad es un aspecto clave a la hora del diseño y operación de una planta química. En todo momento debe seguirse la legislación vigente relativa a las diferentes normativas seguridad existentes. Asimismo, debe garantizarse la adopción de las medidas pertinentes que garanticen un espacio seguro a los trabajadores de la planta.

El proceso de HPPO conlleva el empleo de sustancias consideradas como peligrosas, no obstante, estas son ampliamente utilizadas en la industria intermedia y tomando las medidas adecuadas, no suponen un obstáculo a la viabilidad técnica de la planta.

En lo referente a las condiciones de operación, el proceso está caracterizado por trabajar a temperaturas menores de 120 °C y con una presión máxima, encontrada exclusivamente en el reactor, de 28 bar, por lo que no representan un peligro para los equipos ni la seguridad de los operarios si se mantiene en todo momento un protocolo de seguridad y mantenimiento adecuado.

Más adelante, en el apartado *11. Seguridad* se llevará a cabo un estudio de seguridad del diseño y operación de la planta de HPPO, donde se realizará un estudio de reactividad, se hará un análisis elemental de los riegos, se calcularán las distancias de seguridad de los diferentes equipos, entre otros aspectos relevantes.

7.5. Ámbito económico

En todo plan industrial es fundamental tener en cuenta las consideraciones económicas relacionadas con el mismo. De esta manera, es necesario conocer en primera instancia si el proyecto será rentable y que, al mismo tiempo, se disponga de fuentes de financiación con las cuales llevar a cabo el objetivo propuesto.

De acuerdo con fuentes consultadas, el precio actual de un kilogramo de óxido de propileno es de alrededor de 1,64 €, el del propileno de 0,85 € y el del peróxido de hidrógeno de 0,43 €, es posible realizar una primera aproximación de la estimación de la viabilidad económica a partir del beneficio bruto que resultaría de restar el precio de venta del PO del coste de los materiales de partida, asumiendo unas ventas del 100% producido. Para este cálculo se toma en consideración que se necesitan aproximadamente 1 kg de propileno de alta pureza y 1 kg de H₂O₂ al 60% por cada kg de PO fabricado. De esta manera, se obtiene un beneficio bruto de 0,36 € por kg de óxido de propileno vendido.

Por otro lado, como fue mencionado en la justificación de la localización, el Programa Operativo Fondo Europeo de Desarrollo Regional de Aragón 2014-2020 promueve ayudas a la industria con la finalidad de mejorar la competitividad de las PYME. El 29 de septiembre de 2016 fue publicado en el Boletín Oficial de Aragón la Orden EIE/1220/2016, de 8 de septiembre, por la

que se establecen las bases para la concesión de ayudas del Programa de ayudas a la industria y la PYME en Aragón. Estas ayudas tienen un amplio alcance y entre las actividades que cubren están incluidas las inversiones productivas (56). Por lo tanto, se considera la posibilidad de contar con el apoyo económico por parte de la Administración.

Ya que este proyecto es una obra nueva, será necesario solicitar un préstamo a una entidad financiera con la finalidad de conseguir la totalidad de los recursos requeridos para realizar la inversión inicial. De esta manera, se deberá realizar el cálculo del valor completo del préstamo mencionado, capaz de cubrir el monto requerido. Al ser, a priori, un proyecto rentable, se asume que la empresa será capaz de soportar y devolver dicho préstamo en un plazo establecido y que, además, los intereses no tendrán una gran influencia dentro del beneficio total.

Finalmente, luego de analizar todos estos puntos es posible determinar que la instalación de la planta es técnicamente viable.

8. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

El presente proyecto se basa en el diseño de una planta industrial que produce 150 kt/año de óxido de propileno a partir de peróxido de hidrógeno empleando la tecnología Evonik-Uhde HPPO de los licenciarios Evonik y Thyssenkrupp Industrial Solutions.

8.1. Otros compuestos químicos

En apartados previos fueron estudiadas las materias primas empleadas (propileno y peróxido de hidrógeno) y el producto de interés (óxido de propileno). A continuación, se hará una breve descripción de otros compuestos químicos de relevancia que participan en el proceso HPPO.

8.1.1. Metanol

El metanol, también denominado alcohol metílico o carbinol, con fórmula molecular CH_3OH , es una de las sustancias más importantes empleadas a nivel industrial como materia prima. Es utilizado tanto como material de partida en la industria química como disolvente para síntesis. En el caso del proceso de estudio, para la fabricación de óxido de propileno a partir de peróxido de hidrógeno, se utiliza como disolvente. También tiene un uso en actual crecimiento en el sector energético.

Este compuesto químico fue obtenido por primera vez en 1661 por Sir Robert Boyle mediante la rectificación de vinagre de madera sobre leche de lima. Sin embargo, no fue hasta la década de 1920 cuando M. Pier logró hacer factible la producción de metanol a gran escala gracias al desarrollo de un catalizador de óxido de zinc y óxido de cromo resistente al azufre ($\text{ZnO-Cr}_2\text{O}_3$).

Relativo a sus propiedades físicas, en condiciones ambiente, el metanol es un líquido con una polaridad relativamente alta, sin color y que se usa como disolvente orgánico dado que puede

disolver sustancias con una polaridad media o elevada. Es miscible en agua, alcohol, varios disolventes orgánicos y en algunos aceites y grasas.

Respecto a propiedades químicas, el metanol es el alcohol alifático más simple. Su reactividad está determinada por el grupo funcional hidroxilo. Las reacciones con metanol tienen lugar vía la ruptura del enlace C–O, o bien, O–H y se caracterizan por la sustitución del grupo –H o –OH (1).

En la Tabla 8 es posible observar las principales propiedades físicas y termodinámicas de este compuesto.

Tabla 8. Propiedades físicas y termodinámicas del metanol. Fuente: (1)

Propiedad	Valor
Peso molecular, g/mol	32,04
Densidad, kg/m^3 a 25°C	786,68
Punto de ebullición, temperatura ambiente, K	337,8
Viscosidad, $mPa.s$ a 25°C	0,5513
Calor específico, $J/(mol)(^{\circ}C)$, a 25°C, 101,3 kPa	80,9
Entalpía de formación, kJ/mol	-205
Temperatura crítica, $^{\circ}C$	513
Presión crítica, MPa	8,1
Conductividad térmica, $mW/(m)(K)$	190,16
Punto flash, K	288,75

8.1.2. Agua

El agua, sustancia compuesta por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno, es uno de los compuestos más abundantes y esenciales de la Tierra. Se trata de un líquido inodoro e incoloro que tiene la habilidad fundamental de disolver una gran variedad de sustancias (60).

En la planta de producción de óxido de propileno el agua tiene gran participación. Esta es alimentada al proceso con el peróxido de hidrógeno y el metanol. Asimismo, en la etapa de reacción se consigue como coproducto principal en conjunto con el óxido de propileno, obteniéndose en las mismas proporciones molares. Finalmente, el agua sale del proceso hacia una planta de tratamiento para purificarla y separar productos de valor, tales como el propilenglicol.

En comparación con otros disolventes, el agua presenta propiedades únicas que son altamente sensibles a la temperatura y la presión. Estas resultan de la estructura y distribución de la carga en la molécula de agua. El agua es la única sustancia inorgánica que, bajo condiciones ambientales de la naturaleza, se puede encontrar en fase sólida, líquida o vapor.

El conocimiento de las propiedades generales del agua pura y su comportamiento anómalo son un requisito para la comprensión de sus propiedades como disolvente, pues la mayoría de los métodos para evaluar y predecir datos en sistemas no acuosos no son de utilidad para el caso de soluciones acuosas. Estas diferencias son resultado, en cierta parte, de los fuertes puentes de hidrógeno que ocurren en el agua, sin embargo, lo que explica en realidad la singularidad del agua es la existencia de una red tridimensional entre sus moléculas (1).

Las propiedades principales del agua son reflejadas en la Tabla 9 a continuación.

Tabla 9. Propiedades físicas y termodinámicas del agua. Fuente: (1)

Propiedad	Valor
Peso molecular, g/mol	18,02
Punto de ebullición, $^{\circ}C$ a 101,3 kPa	100
Punto de congelación, $^{\circ}C$	0
Densidad, kg/m^3 a $25^{\circ}C$	997,1
Viscosidad, $mPa.s$ a $20^{\circ}C$	1,002
Calor específico, $J/(g)(^{\circ}C)$ a $25^{\circ}C$	
Líquido	4,182
Entalpía de vaporización, $J/(g)(^{\circ}C)$	
a $25^{\circ}C$	2443
en el punto de ebullición	2258
Entalpía de formación, kJ/mol a $25^{\circ}C$	-285,82
Temperatura crítica, $^{\circ}C$	374,2
Presión crítica, MPa	21,44

8.1.3. Oxígeno

El oxígeno es un elemento no metálico perteneciente al grupo 16 de la Tabla Periódica de los Elementos. Su descubrimiento como elemento químico no se realizó hasta el siglo XVIII. En el año 1774 J. Priestley fue capaz de aislar este elemento al descomponer óxido de mercurio con el calor derivado de una potente lupa.

El oxígeno es esencial para la vida y es el elemento más abundante en la Tierra: 456000 ppm. Es un componente del aire y el agua, supone el 23,2% en peso de la atmósfera, 85,8% en peso del agua marina y 46,6% de la corteza terrestre, donde forma parte de los aluminosilicatos, los óxidos y las oxisales.

Se trata de un gas que, bajo condiciones estándar, es incoloro, inodoro e insípido. Sus puntos de fusión y ebullición son muy bajos, es un elemento con muy poca densidad y también poco reactivo. En la Tabla 10 se muestran las propiedades físicas y termodinámicas principales. Su

escasa reactividad se debe a que habitualmente se presenta como molécula diatómica: dioxígeno (O_2). El doble enlace que une los dos átomos de oxígeno es responsable de que la molécula sea bastante inerte. Sin embargo, a pesar de esta inercia, la presencia de agua, dióxido de carbono y el incremento de la temperatura consiguen activar su reactividad y ayuda a que se produzca la reacción con los metales (proceso comúnmente conocido como corrosión) y a que muchos otros compuestos sufran el proceso de oxidación.

En la obtención de este elemento se emplean muchos de los compuestos en que se presenta en la naturaleza. Algunos de los posibles métodos de obtención son: realizando una destilación fraccionada con aire licuado; partiendo de agua, por electrólisis; o realizando la descomposición térmica de alguno de sus muchos derivados como óxido de mercurio, clorato potásico o mismo peróxido de hidrógeno (la descomposición de este último compuesto será responsable de la existencia de oxígeno en el proceso HPPO).

Actualmente el oxígeno es producido a gran escala y cada año su producción industrial se ve incrementada. Esto es debido a la variedad de sus usos: más de la mitad de la producción se consume en procesos aceleradores de la combustión, de modo especial en la industria metalúrgica. Destaca también su uso como asistente respiratorio, su empleo como combustible líquido y, a menor escala, es utilizado en procesos de oxidación de sustancias orgánicas y como refrigerante, aunque la peligrosidad del oxígeno líquido es superior a la del nitrógeno (61). A continuación, en la Tabla 10 se presentan algunas propiedades de este gas.

Tabla 10. Propiedades físicas y termodinámicas del oxígeno. Fuente: (1)

Propiedad	Valor
Peso molecular, g/mol	15,9994
Densidad, kg/m^3 en gas a 21,1°C, 101 kPa	1,3088
Punto de ebullición, °C a 101 kPa	-182,96
Punto de fusión, °C a 101 kPa	-218,35
Viscosidad, $Pa.s$ en gas a 25°C, 101 kPa	20,56E-6
Calor específico, $J/(mol)(^{\circ}C)$, a 25°C, 101,3 kPa	80,9
Entalpía de vaporización, kJ/kg a -183°C	213,06
Entalpía de fusión, kJ/kg a -218°C	13,86
Temperatura crítica, °C	-118,57
Presión crítica, kPa	50431

8.1.4. Propilenglicol (PG)

El propilenglicol, abreviado PG, y también conocido como 1,2-propanodiol, es un líquido viscoso, estable e higroscópico. Pertenecce a la familia de los alcoholes, en concreto, es un glicol.

Es incoloro y tiene un ligero olor y sabor ácido. Se trata de un compuesto químico orgánico completamente miscible con el agua y muchos otros disolventes orgánicos. Asimismo, es capaz de disolver numerosas resinas, tintes y aceites.

En la Tabla 11 se muestran las principales propiedades físicas y termodinámicas del PG.

Tabla 11. Propiedades físicas y termodinámicas del propilenglicol. Fuente: (62)

Propiedad	Valor
Peso molecular, <i>g/mol</i>	76,09
Punto de ebullición, °C a 101,3 kPa	187
Punto de congelación, °C	-60
Densidad, <i>kg/m³</i> a 25°C	1032
Viscosidad, <i>cp</i> a 20°C	56
Calor específico, <i>J/(g)(°C)</i> a 25 °C	2,481
Entalpía de vaporización, <i>J/(g)(°C)</i> a 25°C	711
Solubilidad en agua, %	100
Temperatura de autoignición, °C	371

La molécula de PG contiene un grupo hidroxilo primario y otro secundario. Debido a que tiene un carbón asimétrico, presenta dos enantiómeros: (R)-1,2-propanediol y (S)-1,2-propanediol. Su fórmula molecular es C₃H₈O₂.

La primera producción industrial de propilenglicol usaba el proceso de la clorihidrina para la obtención de PO y, posteriormente, el PO se hidrolizaba. En el proceso HPPO se produce PG debido a la reacción del óxido propileno producido con el agua formada. Este compuesto es manufacturado como subproducto. Entre los principales usos finales del propilenglicol destaca su empleo como refrigerante, disolvente industrial, producto químico intermedio, así como su utilización en pinturas y revestimientos. Además, debido a su baja toxicidad para los humanos en comparación con otros glicoles, es empleado en cosméticos, productos farmacéuticos y como hidratante de alimentos (63).

8.1.5. Metoxipropanol

Específicamente 1-metoxi-2-propanol y, en pequeñas proporciones, 2-metoxi-1-propanol. Este se obtiene como subproducto del proceso por la reacción secundaria entre el óxido de propileno y metanol. Sin embargo, suele presentarse en muy pequeñas cantidades en relación con la del producto principal, por lo que no se considera una gran complicación para el proceso. Es necesario, de todas formas, el control de las condiciones de reacción para evitar que este producto afecte de manera significativa al rendimiento global del proceso.

El metoxipropanol es un líquido incoloro con un olor débil, miscible en cualquier proporción en agua y en disolventes orgánicos. Es empleado a nivel comercial mayormente como disolvente, y sus propiedades son altamente comparables a las del etilenglicol. Es ligeramente más volátil que este, y su función como componente de pinturas y tintas de impresión es mejorar la mojabilidad de algunos pigmentos y colorantes (1). Este compuesto se produce a nivel mundial en un volumen de 100 a 500 mil toneladas anuales. Es una sustancia altamente inflamable, por lo que debe ser almacenado en un área fresca, seca y bien ventilada, libre de cualquier fuente de ignición (64). En la Tabla 12 se presentan las principales propiedades de este compuesto.

Tabla 12. Propiedades físicas y termodinámicas del metoxipropanol. Fuentes: (64), (65)

Propiedad	Valor
Peso molecular, g/mol	90,12
Punto de ebullición, $^{\circ}C$ a 101,3 kPa	102,34
Punto de congelación, $^{\circ}C$	-96,6
Densidad, kg/m^3 a $25^{\circ}C$	919
Gravedad específica	0,924
Punto flash, $^{\circ}C$	33

8.1.6. Servicios auxiliares/Utilidades

A lo largo del proceso de producción se emplean numerosas corrientes auxiliares necesarias para su correcto desempeño. Se tratan de servicios que se encuentran disponibles en planta. A continuación, se presenta un resumen de cada uno de ellos (66).

- Agua refrigerada (*cw*): agua refrigerada que ingresa al proceso a una temperatura de 7 grados centígrados y es empleada para mantener el reactor R-101 a su temperatura óptima a medida que transcurre la reacción.
- Vapor de media presión (*mps*): vapor de agua alimentado a 10 bar y $179,9^{\circ}C$. Este es utilizado para aportar energía a las corrientes del proceso en diversos equipos, tales como las calderas de las columnas de destilación.
- Agua de refrigeración (*cw*): empleada con el fin de enfriar ciertas corrientes, ingresa al proceso a una temperatura de alrededor de $25^{\circ}C$.
- Salmuera de refrigeración (*rb*): consiste en salmuera de cloruro de sodio al 22%, alimentada a una temperatura de $-21^{\circ}C$ y útil para condensar la corriente de reflujo de la columna T-302.

8.2. Secciones del proceso

Para un estudio en detalle del proceso, este es dividido en tres secciones, tal y como se muestra en la Figura 34:

- Sección 100: tiene lugar el acondicionamiento de las materias primas del proceso y la etapa de reacción.
- Sección 200: se realiza la separación del propileno y su posterior recirculación.
- Sección 300: el óxido de propileno es purificado y se procede a la separación del metanol para su recirculación.

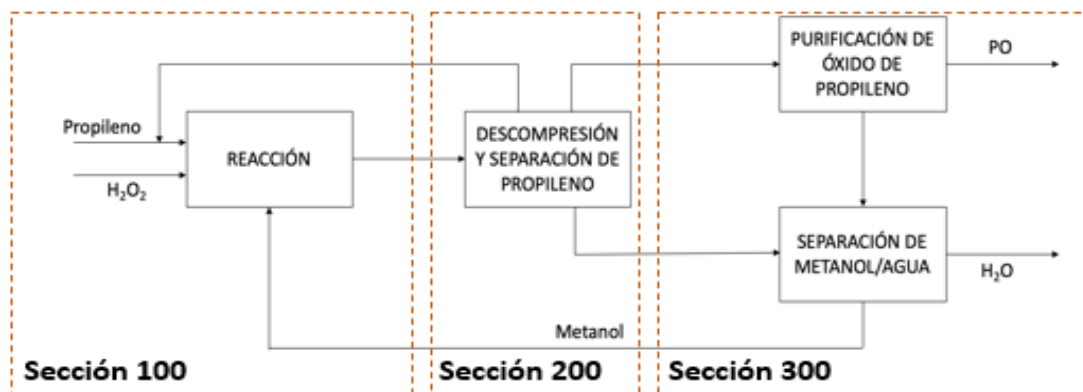


Figura 34. Diagrama de bloques con las secciones del proceso HPPO. Fuente: elaboración propia

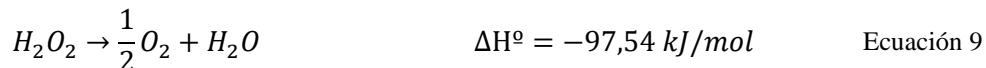
A continuación, se realizará una descripción de las principales operaciones que tienen lugar en cada una de las secciones.

8.2.1. Sección 100: Acondicionamiento de materias primas y reacción

Se trata de la primera sección del proceso, donde se introducen las materias primas suministradas por proveedores externos en las proporciones adecuadas y se juntan con los productos recirculados, principalmente propileno y metanol. Mediante el uso de la bomba P-101 A/B y el intercambiador de calor E-101, se acondicionan los compuestos químicos para obtener las condiciones de operación necesarias a la entrada del reactor (R-101): una temperatura de 55°C y 28 bar de presión, de esta forma se asegura que la mezcla reaccionante se encuentra en fase líquida.

El reactor empleado es de lecho fijo y adopta una configuración de carcasa y tubos, pues la reacción química sucederá en el interior de los múltiples tubos que conforman el haz de tubos y que se encuentran rellenos de partículas de catalizador (*pellets*) del tipo zeolitas de silicalita de titanio (TS-1). Debido al carácter exotérmico de las reacciones que suceden en el lecho catalítico, se emplea agua de enfriamiento como fluido de transferencia de calor con el objetivo de una eficiente retirada de todo el calor producido y que permita mantener la temperatura constante en el interior de los tubos. De esta forma, el reactor es operado en régimen isotérmico.

Las ecuaciones 7, 8 y 9 representan las tres reacciones que ocurren en el reactor: la epoxidación del propileno, considerada la reacción principal, la reacción en serie de formación de propilenglicol y la reacción paralela de descomposición del peróxido de hidrógeno, respectivamente.



Asimismo, resulta necesario utilizar una disolución metanol/agua para conseguir la óptima epoxidación de la olefina. Puesto que el reactivo de mayor valor es el peróxido de hidrógeno, para asegurar la obtención de la mínima cantidad de este compuesto a la salida del reactor, se utiliza propileno en exceso. Empleando los parámetros optimizados del proceso, es posible obtener selectividades a PO y conversiones del peróxido de hidrógeno superiores al 95%.

El último equipo de la sección es la válvula de expansión, VLV-101, donde se despresuriza la corriente 7, procedente de la salida del reactor, a una presión ligeramente superior a la atmosférica.

8.2.2. Sección 200: Separación y recirculación de propileno

Esta sección se centra en el reaprovechamiento del propileno no reaccionado. Como se mencionó anteriormente, esta olefina es utilizada como el reactante en exceso. Por consiguiente, a la salida del reactor R-101 se obtiene una elevada cantidad de propeno que debe ser separado y reintroducido en el proceso, pues resulta una importante fuente de ahorro en requerimientos de materia prima. En el separador flash V-201 se realiza la separación de la fase gaseosa rica en propeno obtenida tras la descompresión en la válvula VLV-101. La corriente 9 conduce el gas separado al compresor C-201 donde se comprime y posteriormente se condensa parcialmente en el intercambiador E-201.

A continuación, por la parte superior del flash V-202 se obtiene una corriente de *off-gas* (principalmente compuesta por el oxígeno procedente de la descomposición del peróxido de hidrógeno y una pequeña cantidad de propeno), la cual es retirada y enviada a los límites de batería del proceso. La corriente líquida obtenida a la salida del flash es recirculada, empleando la bomba P-201 A/B, a la sección de reacción. Por otro lado, la corriente líquida obtenida en la salida inferior del flash V-201 es ingresada a la sección 300, hacia la primera columna de destilación del proceso.

8.2.3. Sección 300: Purificación de PO y recirculación de metanol

La sección 300 es clave para la obtención del elevado grado de pureza de óxido de propileno exigido (99,97% en peso). Asimismo, la eficiente separación y posterior recirculación del metanol resulta fundamental para la economía del proceso.

El líquido obtenido a la salida del flash V-201 es transferido a la columna de destilación T-301 donde se procede a efectuar la separación del óxido de propileno y el propileno de la mayor parte del agua y el metanol. A continuación, una segunda columna de destilación, la T-302, se encarga de la retirada del propeno restante. El propeno separado se comprime en el compresor C-301 para posteriormente unirse a la corriente en fase gas obtenida en el flash V-201.

Asimismo, el producto de colas de la columna T-302, compuesto mayoritariamente por óxido de propileno y metanol, se destina a la torre de destilación T-303, donde se realiza la purificación que permite al destilado de PO cumplir con los requerimientos de pureza y retirarlo hacia el límite de batería como producto final.

Las corrientes 22 y 25, obtenidas a la salida de colas de las columnas de destilación T-301 y T-303 respectivamente, se encuentran principalmente compuestas por metanol y agua. Como fue mencionado previamente, resulta necesaria la separación del metanol para su reutilización como disolvente en el interior del reactor. Así, los intercambiadores de calor E-307 y E-308 son empleados para enfriar dichas corrientes hasta la temperatura en la que, a la presión de trabajo de la columna de destino, la mezcla resultante de ambas sea un líquido saturado. Previamente a su unión, las válvulas VLV-301 y VLV-302 permiten el ajuste de la presión de estas corrientes antes de ingresar a la columna de destilación T-304 para su operación a presión atmosférica. Es posible alcanzar eficacias de hasta el 99,94% de recuperación del metanol de entrada, el cual es retirado en la corriente de destilado y recirculado a la sección de reacción haciendo uso de la bomba P-305 A/B. El producto obtenido por colas en esta última columna de destilación, compuesto mayoritariamente por agua y algunas trazas de propilenglicol formado como subproducto en la reacción en serie, se envía a los límites de batería para su posterior tratamiento.

9. DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS

9.1. Lista de equipos

En la Tabla 13 se recogen todos los equipos que constituyen el proceso de producción de PO, así como la nomenclatura que será empleada para cada uno de ellos.

Tabla 13. Listado de equipos del proceso

Equipo	Nomenclatura
Sección 100	
Bomba de acondicionamiento alimentación	P-101 A/B
Intercambiador de calor de acondicionamiento alimentación	E-101
Reactor	R-101
Válvula de salida del reactor R-101	VLV-101
Sección 200	
Separador flash	V-201
Compresor de propeno	C-201
Condensador de propeno	E-201
Flash de recirculación de propeno	V-202
Bomba de recirculación de propeno	P-201 A/B
Sección 300	
Columna de destilación preseparadora	T-301
Columna de destilación C ₃	T-302
Compresor cabezas C ₃	C-301
Columna de destilación purificación PO	T-303
Intercambiador de calor colas purificación PO	E-307
Válvula colas purificación PO	VLV-301
Intercambiador de calor colas preseparadora	E-308
Válvula colas preseparadora	VLV-302
Columna de destilación Metanol-Agua	T-304
Bomba de recirculación metanol	P-305 A/B

Cabe destacar que cada columna de destilación consta de un condensador, un recipiente que recoge el líquido de salida del condensador, una bomba que impulsa la corriente de reflujo hasta la columna y una caldera que vaporiza la corriente que es retornada a la base de la columna.

9.2. Equipos en sección 100

9.2.1. Bomba P-101 A/B

Se trata de una bomba centrífuga responsable de impulsar hasta el reactor los compuestos químicos procedentes del almacén junto con las corrientes recirculadas y ajustar la presión desde 11 hasta 28 bar.

9.2.2. Intercambiador de calor E-101

Intercambiador que tiene como función el acondicionamiento de los compuestos de entrada al proceso. Se emplea vapor a media presión como utilidad para transferir el calor necesario que permita establecer una temperatura de 55°C a la entrada del reactor.

9.2.3. Reactor R-101

Reactor catalítico multitubular de lecho fijo donde se produce la reacción de epoxidación del propileno y otras reacciones secundarias, todas de carácter exotérmico. Puesto que se opera

isotérmicamente a 55°C, se emplea agua refrigerada para efectuar la retirada del calor generado con el avance de las reacciones. Adopta la configuración de un intercambiador de calor de carcasa y tubos, donde la utilidad circula por carcasa y la reacción tiene lugar en el interior de los múltiples tubos internos que se encuentran rellenos de partículas de catalizador. Las reacciones suceden en fase líquida y se produce una caída de presión a la salida del reactor de 0,28 bar. Este equipo será diseñado de manera rigurosa en el Anexo II.

9.2.4. Válvula VLV-101

Válvula de expansión cuya finalidad es la descompresión de la corriente líquida obtenida a la salida del reactor R-101, obteniéndose un flujo bifásico que será separado en el tanque flash V-201. La presión se ve disminuida de 27,72 hasta 6 bar.

9.3. Equipos en sección 200

9.3.1. Flash V-201

En este tanque flash se separan las dos fases obtenidas por la descompresión en la válvula V-201, resultando una corriente gaseosa rica en propeno y otra líquida conteniendo el óxido de propileno que debe ser purificado.

9.3.2. Compresor C-201

Con el objetivo de ajustar la presión de la corriente portadora del propileno que será recirculado, se comprime la corriente gaseosa procedente del flash V-201 junto con el propileno separado en la columna T-302 desde una presión de 6 hasta una de 9,2 bar.

9.3.3. Intercambiador de calor E-201

En este equipo se lleva a cabo la condensación parcial de la corriente anteriormente comprimida empleando agua de enfriamiento como utilidad. De esta forma, es posible obtener una mezcla de con una fracción de vapor de 0,06, preparada para ser separada en el tanque Flash V-202.

9.3.4. Flash V-202

Este recipiente es utilizado para conseguir la separación de la corriente proveniente del condensador E-201 en una corriente de *off-gas* y otra con propileno líquido, el cual será recirculado a la sección de acondicionamiento de materias primas y reacción.

9.3.5. Bomba P-201 A/B

Bomba centrífuga que impulsa la corriente líquida obtenida en el flash V-202 para su reutilización hacia el inicio del proceso. Aumenta la presión de la corriente recirculada de 9,1 a 11 bar.

9.4. Equipos en sección 300

9.4.1. Columna de destilación T-301

Columna fraccionadora que opera a una presión de 5,5 bar, donde se efectúa la separación por cabezas del propileno que no pudo ser retirado en el flash V-201 y el óxido de propileno, mientras que por colas sale una mezcla de metanol y agua con trazas de propilenglicol. La torre cuenta con un condensador parcial, pues, al operar con gases de puntos de ebullición muy bajos, se consigue un ahorro de energía al condensar solo lo necesario para el reflujo del equipo. La utilidad de enfriamiento empleada en el condensador es agua de refrigeración, mientras que vapor de media presión es utilizado para aportar calor en la caldera.

9.4.2. Columna de destilación T-302

Columna de destilación con una presión de operación de 4,4 bar y condensador parcial, encargada de separar por la corriente de cabezas el propileno remanente en el proceso del resto de compuestos, con el fin de juntarlo con el vapor de salida del flash V-201 y posteriormente recircularlo al inicio del proceso. Al trabajar con un fluido con un punto de ebullición muy bajo, se hace necesario usar un fluido para enfriar que permita alcanzar temperaturas tan reducidas, de esta manera, se emplea salmuera refrigerada. Por otro lado, en la caldera se hace uso de vapor de media presión.

9.4.3. Compresor C-301

Empleado para ajustar la presión del destilado de la columna T-302 hasta igualarla con la corriente de salida gaseosa del separador flash V-201, 6 bar.

9.4.4. Columna de destilación T-303

Torre que opera a 3,5 bar, en la cual se lleva a cabo la purificación del óxido de propileno para alcanzar las especificaciones del producto. Este es separado por la parte superior de la columna junto con una pequeña porción de metanol y trazas de propileno arrastrado desde los equipos anteriores. Por la corriente de colas se separa toda el agua y el metanol que ingresan a la columna. Las utilidades en este caso son, una vez más, agua de refrigeración y vapor de media presión.

9.4.5. Intercambiador de calor E-307

Mediante el uso de agua de refrigeración enfría la corriente de colas de la columna purificadora de PO hasta 68,34 °C, temperatura a la cual la corriente de entrada a la torre T-304 se encuentra como líquido saturado.

9.4.6. Válvula VLV-301

Lleva a cabo la disminución de presión hasta 1,19 bar de la corriente de salida de la columna purificadora de PO, luego de haber sido enfriada, previamente a la entrada a la columna T-304.

9.4.7. Intercambiador de calor E-308

Lleva al producto de colas de la torre T-301 (preseparadora) hasta la temperatura adecuada para su entrada a la columna de separación metanol-agua, retirando el calor empleando agua de refrigeración.

9.4.8. Válvula VLV-302

Válvula utilizada para reducir la presión del producto de colas de la columna preseparadora T-301 hasta las condiciones de entrada a la columna de destilación metanol-agua (T-304).

9.4.9. Columna de destilación T-304

Columna de destilación cuyo objetivo es recuperar casi en su totalidad (un 99,94%) el metanol alimentado para su posterior recirculación a la etapa de reacción, separándolo del agua residual con trazas de propilenglicol, retirada por la corriente de colas hacia el límite de batería. La torre opera a presión atmosférica y consta de 26 platos. Para conseguir el aporte de calor requerido en la caldera se hace uso de vapor de agua de media presión. Asimismo, en el condensador se emplea agua de refrigeración para retirar la energía pertinente. Este equipo será explicado de forma detallada en el *Anexo II*, donde se especifica su diseño riguroso.

9.4.10. Bomba P-305 A/B

Impulsa la corriente de metanol, producto de cabezas de la columna T-304, hasta una presión de 11 bar para reincorporarla al inicio del proceso.

10. CONTROL E INSTRUMENTACIÓN

En este apartado serán establecidos los mecanismos de control del proceso productivo en cuestión, especificando para cada lazo su estrategia de control, la selección de variables controladas y manipuladas y la instrumentación necesaria en cada caso. En primer lugar, se presentará una introducción teórica que incluya los aspectos más importantes del control y la instrumentación de procesos a partir de las bibliografías (67) y (68).

Asimismo, en el diagrama de tuberías e instrumentación, comúnmente conocido como *P&I*, del documento de *Planos*, se muestra el esquema detallado del control seleccionado para la Planta de Producción de Óxido de Propileno.

10.1. Introducción

El control de procesos se puede definir como el mantenimiento de las condiciones deseadas de un sistema, ajustando de forma manual o automática determinadas variables de dicho sistema. La variable que se desea mantener en un valor deseado se denomina variable de proceso o controlada. Este valor es conocido como punto de consigna o *set-point*. Una perturbación es una variable externa al sistema de control que afecta a la variable controlada y sobre la que no se puede actuar,

pues su valor está impuesto por el mundo exterior. Para conseguir compensar o corregir los efectos de las perturbaciones debe modificarse una variable, denominada variable manipulada. Las perturbaciones suelen ser de tres tipos:

- De entrada: un cambio en la masa o energía de alimentación al proceso.
- De carga: cualquier otra alteración que desvíe la variable de proceso de su valor deseado.
- De punto de consigna: ocurre cuando el valor deseado de la variable de proceso cambia, y el proceso se debe ajustar a un nuevo estado estacionario.

Todo sistema de control debe satisfacer las siguientes necesidades: eliminar la influencia de las perturbaciones externas, asegurar la estabilidad del proceso y optimizar su funcionamiento. Los sistemas de control de procesos están constituidos por cuatro componentes:

- Elemento primario (sensor/transmisor): este es el instrumento utilizado para medir la variable a controlar o, en su defecto, las variables secundarias, a partir de las cuales se infiere el valor de la que se quiere controlar, si esta no puede medirse directamente. Además, el efecto físico producido en el sensor no suele ser directamente utilizado como señal, por lo que se requiere convertir la magnitud física en una señal estándar que pueda ser transmitida a distancia y que sea comprendida por un controlador. De esto se encarga el transmisor.
- Controlador: este recibe la señal de la variable medida y calcula la acción de control de acuerdo con el algoritmo de control que se haya programado en él. Este cálculo se traduce en un valor dado de la señal estándar de salida que se envía al elemento final de control.
- Elemento final de control (usualmente válvulas de control): este manipula la variable de proceso de acuerdo con la acción calculada por el controlador. En procesos químicos la variable de proceso manipulada suele ser el caudal de una corriente, y por ello el elemento más utilizado es la válvula de control. Estas válvulas cuentan con actuador para abrirlas o cerrarlas y un posicionador encargado de regular el flujo.
- Proceso: es el sistema que está siendo controlado. Lo conforma el equipo material donde tienen lugar las operaciones físicas o químicas (tanques, intercambiadores de calor, reactores...).

El sistema de control está abierto o en manual cuando el controlador no está conectado al proceso y, en consecuencia, la acción correctora calculada por aquel no se traduce en un cambio en la variable manipulada. El operador puede actuar manualmente sobre el proceso a través del controlador, cambiando la señal que sale de este hacia el elemento final de control. Cuando el sistema de control está cerrado o en automático, la salida del controlador es la calculada por este en función de la información recibida del proceso y la ley de control implementada.

Para el diseño de un sistema de control de un proceso se requiere conocer su comportamiento dinámico. Las características dinámicas fundamentales de un proceso son la capacitancia y el tiempo muerto. La capacitancia representa la habilidad de un sistema de absorber o almacenar materia o energía. También puede definirse como la resistencia del sistema a cambios de materia o energía almacenada. Además, el tiempo muerto es la característica de un sistema físico que causa que una perturbación de entrada se demore en el tiempo. En otras palabras, es el intervalo de tiempo entre que se provoca una perturbación a un sistema y que el sistema responde a esta.

Cuando se habla de un elemento de control del proceso, este puede ser de acción directa o inversa. Acción directa se refiere a un elemento de control que, al producirse un incremento en su entrada, también experimenta un aumento de su salida. A esto se le llama relación incremento/incremento (I/I). Si, por otro lado, en un elemento de control al aumentar su entrada disminuye su salida, se dice que es un elemento de acción inversa, con una relación incremento/disminución (I/D). Los elementos que suelen ser de acción directa son los elementos primarios y los elementos finales de control. Además, los procesos son, en su mayoría de acción directa, aunque también pueden ser de acción inversa. El último elemento por especificar es el controlador. La selección correcta del tipo de actuación del controlador -directa o inversa- es de vital importancia para el correcto funcionamiento del lazo de control. Si se selecciona acción directa, ante un incremento en la variable controlada la señal de salida del controlador aumentará y sucederá lo contrario si el tipo de actuación seleccionada es la inversa.

El método de control de procesos más simple y ampliamente utilizado es el control por realimentación o *feedback*. El control por *feedback* se basa en la medida de la variable de proceso y comparación del valor medido con el punto de consigna, generándose un error. Este error se emplea para actuar sobre el proceso y compensar el efecto producido por perturbaciones externas.

Aunque menos habitual, existe también un tipo de control anticipativo, denominado *feedforward*, en el que se emplean medidas directas de las perturbaciones para ajustar los valores de las variables manipuladas. De esta forma se pretende mantener los valores de la variable de proceso en los niveles deseados sin esperar a que se produzca un cambio en la variable de proceso.

Adicionalmente, otras técnicas más avanzadas de control pueden ser útiles para optimizar los sistemas de control de los procesos. Una de ellas, ampliamente utilizada a nivel industrial, es el control en cascada. Esta consiste en un lazo de control *feedback* anidado dentro de otro mediante el empleo de dos controladores. La salida del controlador primario actúa como el punto de consigna para el secundario. Este último será el que manipule al elemento final de control (válvula).

El algoritmo de control o ley de control se refiere a las ecuaciones internas del controlador. Para controladores del tipo de realimentación, el algoritmo se construye combinando tres tipos de

acciones básicas de control: acción proporcional (P), acción integral (I) y acción derivativa (D). Las tres combinaciones que dan lugar a los tres tipos de algoritmos de control por realimentación más usados son:

- Controlador proporcional (P): es el modo más simple de control continuo que elimina oscilaciones, pero no necesariamente devuelve el proceso a su valor de consigna. Se basa en una expresión matemática en la que la salida del controlador es proporcional al error. Aunque un controlador de este tipo proporciona una respuesta rápida, se obtiene un error sostenido a lo largo del tiempo (conocido como *offset*) cuando la variable de proceso no vuelve al valor de consigna incluso alcanzado el estado estacionario. Para eliminar este *offset* se combina el control proporcional con alguno de los controladores mencionados a continuación.
- Controlador proporcional-integral (PI): la acción del control integral consiste en la eliminación de cualquier error que pueda existir. Mientras haya un error, se continúa actuando sobre el elemento final de control. La acción integral no suele utilizarse sola en un controlador, aunque sea capaz de anular el error. Esto se debe a que la respuesta del lazo sería muy lenta y se tardaría mucho tiempo en corregir el error. Se utiliza muy a menudo junto con la acción proporcional.
- Controlador proporcional-integral-derivativo (PID): la acción derivativa pretende solucionar el problema del retraso en la respuesta que se tiene en el control integral. La acción derivativa aporta tanto más a la señal de control cuanto mayor sea la velocidad de cambio del error. Es capaz de aportar una fuerte acción correctora con errores pequeños, pero, por otro lado, si el error es constante la acción derivativa no aporta acción correctora alguna. En general, esta acción tiene un efecto positivo estabilizador sobre la dinámica del lazo de realimentación. Sin embargo, cuando el lazo tiene ruido (señales de baja amplitud y elevada frecuencia que se superponen a la señal principal) la acción derivativa no debe emplearse, ya que lo amplifica hasta tal punto que produce un comportamiento inaceptable. Esta acción nunca se emplea por sí sola en un controlador, ya que es incapaz de llevar al proceso al régimen permanente deseado, normalmente se añade a controladores PI y forman los PID.

10.2. Nomenclatura

El diagrama P&I (*piping and instrumentation*) es el documento de referencia más importante, tanto en la fase de construcción como en la de operación de una planta de proceso. Todos los diagramas de control de procesos se componen de una serie de símbolos, etiquetas identificativas y líneas con los cuales se representan de manera gráfica las configuraciones, algoritmos y equipos involucrados en el proceso. El estándar ISA-5.1-1984 establece un procedimiento uniforme para la designación de los instrumentos y sistemas de instrumentación empleados en el campo del

control. Así, este código proporciona un sistema de nomenclatura con símbolos y códigos identificativos que será el empleado en esta sección.

Para designar el tipo y función del dispositivo, el código ISA-5.1-1984 hace uso de etiquetas identificativas formadas por letras y números dentro de una figura geométrica. La primera letra (X) se utiliza para designar la variable contralada, es decir, de la que se efectúa su medida. La segunda y tercera letra (YZ) se emplean para hacer referencia a la función del dispositivo. Asimismo, dependiendo de la posición, cada letra tiene asignado uno u otro significado. La nomenclatura de las letras más empleadas se presenta en la Tabla 14.

Tabla 14. Nomenclatura para lazos de control. Fuente: Código ISA-5.1-1984

Símbolo	Significado como primera letra	Significado como letras sucesivas
A	-	Alarma
C	-	Controlador
D	Diferencial	-
F	Flujo	-
H	-	Alto
I	-	Indicador
L	Nivel	Bajo
P	Presión	-
T	Temperatura	Transmisor
V	-	Válvula

Además, la presencia o ausencia de una línea horizontal determina la ubicación del instrumento. Así, una línea continua simboliza que el equipo se encuentra montado en la sala de control y es accesible al operador. En caso de que el operador no tenga acceso a este elemento, se utiliza una línea discontinua. Por último, no se dibuja línea alguna si el equipo se encuentra en planta. La Figura 35 ejemplifica la identificación típica de los elementos de control.

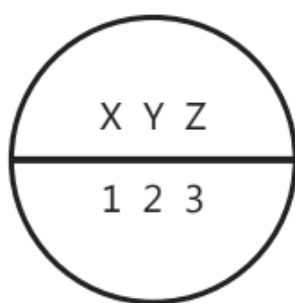


Figura 35. Simbología de control

Luego de descritos los aspectos principales acerca de los sistemas de control, se procede a especificar los lazos que serán implementados en el proceso de producción de óxido de propileno en cuestión.

10.3. Lazos de control en sección 100

Lazo de control 101

El control en el intercambiador de calor E-101 es necesario para mantener una temperatura adecuada (*set-point*, SP) en la entrada del reactor del proceso. La función del equipo es calentar la corriente de interés, por lo que se emplea vapor de media presión como fluido calefactor. De esta manera, se implementará un lazo *feedback*, cuya variable controlada (VP) es la temperatura de salida del fluido de proceso, la cual se mide con un transmisor de temperatura TT-101, que envía una señal (Vm) al controlador e indicador TIC-101. Este último, dependiendo de la información recibida, calcula el error (e) y actúa sobre una válvula de control TV-101, que varía el caudal de entrada del vapor calefactor, siendo esta la variable manipulada (VM) del sistema. A mayor flujo de vapor alimentado en el intercambiador de calor, mayor será la temperatura del fluido de salida, por lo tanto, se establece que el proceso es de acción directa. Asimismo, los medidores son de acción directa, y, salvo que se especifique lo contrario, las válvulas también lo son. De esta manera, se determina que el controlador deberá ser de acción inversa. Es posible apreciar lo explicado anteriormente de manera gráfica en el diagrama de bloques del sistema de control, presentado en la Figura 36, donde se muestran los principales elementos del sistema y el mecanismo de funcionamiento del lazo.

El procedimiento descrito anteriormente debe llevarse a cabo con la finalidad de establecer la acción del controlador para todos los lazos de control presentes en el proceso. No obstante, en este proyecto se analiza solo para el lazo 101 a modo de ejemplo, pues el razonamiento para el resto de lazos es análogo.

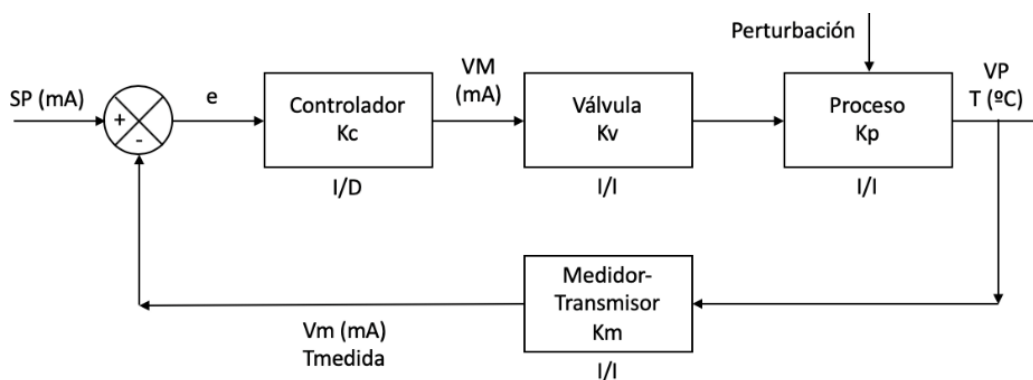


Figura 36. Diagrama de bloques del sistema de control en el equipo E-101. Fuente: elaboración propia

Ya que la temperatura suele tener una respuesta dinámica lenta, normalmente se utiliza un algoritmo de control PID. Sin embargo, esto solo se puede definir a través del ajuste del controlador al proceso. Es por eso por lo que, ni en el presente lazo, ni en ninguno de los establecidos en este proyecto, se definirán los algoritmos de control específicos apropiados, sino

que serán mencionados como guía a partir de las recomendaciones bibliográficas de algoritmos comunes para cada tipo de lazo (67).

Lazo de control 102

El control de la temperatura en el reactor es de suma importancia, pues debe garantizarse en todo momento una efectiva retirada del calor liberado en las reacciones exotérmicas que tienen lugar, asegurando el mantenimiento de una temperatura constante en el interior del lecho que permita alcanzar las conversiones requeridas para cumplir con las exigencias de producción y, al mismo tiempo, minimizar la formación de otros productos indeseados.

Para un apropiado control de la temperatura del reactor R-101 se opta por el empleo de una configuración de control en cascada. Esta técnica utiliza dos controladores con un lazo de control *feedback*, anidado uno en el interior del otro. La salida del controlador primario actúa como punto de consigna para el controlador secundario. Asimismo, el controlador secundario es el encargado del control del elemento final de control (67).

El lazo primario está conformado por el transmisor TT-102A, responsable del envío de la señal de medida de temperatura de la salida del reactor al controlador primario TIC-102A. La salida del controlador TIC-102A se corresponde con el *set-point* del controlador secundario TIC-102B, perteneciente al lazo secundario. El transmisor TT-102B es el encargado de enviar la señal correspondiente a la medida de la temperatura del agua de enfriamiento que entra en el reactor al controlador secundario y, tras este comparar la información recibida con el punto de consigna procedente del controlador primario, se ajusta la válvula que manipula el caudal de entrada de la utilidad, TV-102.

La decisión de insertar un lazo de control avanzado en cascada en el reactor se debe a las fluctuaciones que suele sufrir la temperatura del fluido refrigerante a lo largo de la operación del equipo, con la finalidad de que, a pesar de estas, sea posible mantener el fluido en el reactor a una temperatura igual a la requerida, ya que, de otra manera, el sistema sería incapaz de detectar estos cambios y el control de temperatura sería ineficaz. De esta forma, se consigue una mejora significativa del control al existir una variable secundaria en el sistema (la temperatura de entrada del agua de enfriamiento) que afecta directamente al lazo primario (donde la variable controlada es la temperatura de la mezcla reaccionante a la salida del reactor). Así, el lazo de control interno ayuda a eliminar las perturbaciones que afectan a la variable primaria de control.

10.4. Lazos de control en sección 200

Lazo de control 201

El control de presión resulta necesario para la mayor parte de los equipos donde se trabaja con gases. Por consiguiente, debe realizarse el control de la presión en los tanques flash, pues,

dependiendo del valor alcanzado, varía la eficacia de la separación. Así, para el flash V-201 se emplea un sensor de presión para el interior del tanque (PT-201). Este sensor envía una señal al controlador de presión (PIC-201) que será el encargado de comparar el valor recibido con el *set-point* establecido. De verse superado el punto de consigna, el controlador manipulará el caudal de salida del vapor por la parte superior del tanque empleando una válvula de control (PV-201). Se trata de un lazo de tipo *feedback*: al producirse un aumento del valor de la variable medida (para este caso la presión en el interior del flash), el controlador actúa sobre la válvula de control, aumentando su apertura y, consecuentemente, permitiendo un flujo mayor de la corriente de vapor procedente del equipo. De esta forma, se consigue una disminución de la presión del interior del separador. En el control de presión no existe un algoritmo típico, pues dependiendo del lazo y su respuesta dinámica, se seleccionan diferentes algoritmos de control.

Lazo de control 202

En los tanques flash resulta necesario el control del nivel de líquido para asegurar que se mantenga en un rango aceptable. Por consiguiente, se emplea un lazo *feedback* en el que el transmisor de nivel LT-202, envía en forma de señal el valor medido al controlador LIC-201. Este último elemento realiza la comparación de la información recibida con el punto de consigna y, de existir un error, manipula el flujo de líquido de salida a través de la válvula de control (LV-202). Cuanto mayor sea el nivel del líquido en el tanque por encima del *set-point*, mayor será el porcentaje de apertura de la válvula de control. Se conoce, además, que para lazos de control de nivel se emplea típicamente un algoritmo de tipo PI, sin embargo, como fue mencionado previamente, esto solo puede ser determinado realizando un ajuste del controlador al proceso.

Lazo de control 204

El compresor C-201 requiere un lazo de control de presión con la finalidad de conseguir un valor adecuado que permita una correcta separación posterior del propileno a recircular. Es por esto por lo que se implantará un lazo *feedback*, cuya variable controlada será la presión de salida del compresor. Esta es medida con el transmisor de presión PT-204, el cual proporciona una señal al controlador PIC-204, que dirige una válvula de control de presión PV-204 para que esta regule el caudal de recirculación a reingresar al compresor, siendo este flujo la variable manipulada del lazo. Al producirse una disminución en la presión de salida del compresor, el controlador ordenará una apertura en la válvula que recircule más vapor a alta presión en la entrada del compresor, lo que resultará en la obtención de una mayor presión de la corriente que abandona el equipo. En el caso opuesto, si se detecta una presión elevada en la salida del compresor, la válvula se irá cerrando.

Lazo de control 205

En el condensador parcial E-201 se lleva a cabo la condensación del propileno que será recirculado, consiguiendo a la salida una mezcla de vapor y líquido, la cual es finalmente separada en el flash V-202. Resulta de gran relevancia el control de la temperatura en este intercambiador de calor, pues es fundamental conseguir un grado óptimo de separación que permita eliminar la mayor parte de las impurezas por la corriente de *off-gas* con el fin de una recirculación del propileno lo más puro posible. Para ello, se emplea un lazo *feedback* donde la variable controlada es la temperatura de salida del condensador. Al tratarse de una condensación parcial de una mezcla multicomponente, este parámetro está estrechamente relacionado con la composición de ambas fases a la salida. Se opta por seleccionar como variable manipulada el flujo de refrigerante que es empleado para la condensación parcial de la mezcla que circula a través del condensador E-201 dado que la cantidad de calor retirado determinará cuánto vapor de alimentación es condensado.

El lazo de control consta del transmisor de temperatura TT-205, encargado del envío de la señal de la medida de la temperatura de la corriente 12 al controlador TIC-205, el cual compara la información recibida con el punto de consigna establecido para determinar si es necesario que la válvula de control TV-205 actúe. Esta válvula es la responsable de variar el flujo de la variable manipulada: el caudal de refrigerante a la entrada del condensador E-201. Cuanto mayor sea la temperatura a la salida del condensador (corriente 12), mayor será el flujo de refrigerante alimentado a dicho equipo, con el fin de obtener una fracción de vapor menor.

Lazo de control 206

La justificación del control del nivel de líquido en el flash V-202 sigue el mismo principio del lazo 202. El lazo de control 206 es de tipo *feedback*: el transmisor LT-206 envía la señal de la medida de nivel al controlador e indicador LIC-206, donde se compara la información recibida con el punto de consigna. De generarse un error producido por un nivel en el tanque superior al *set-point*, la válvula VLV-206 aumenta su grado de apertura y el caudal de líquido de salida del tanque se incrementa. Opuestamente, si el error generado es debido a un descenso en el nivel, la válvula de control disminuye su apertura.

Lazo de control 207

El fundamento del control de la presión en el interior del tanque flash V-202 resulta análogo a lo descrito para el lazo 201. El lazo 207 se compone de un transmisor PT-207, el cual se encarga del envío de la señal correspondiente a la presión medida por un sensor hacia el controlador e indicador de presión PIC-207. Este último elemento receptor de la señal es el responsable de determinar si es necesario actuar sobre la válvula de control VLV-207, con la que se regula el

flujo de vapor que sale del equipo (corriente 13). Cuanto mayor sea la presión en el interior del tanque, mayor será la apertura de la válvula con el fin de disminuir la presión con la salida del vapor. Se trata de una configuración tipo *feedback*.

10.5. Lazos de control en sección 300

Esta sección consiste principalmente en cuatro columnas de destilación, dos de las cuales comprenden condensadores parciales. El principal objetivo del control de una columna de destilación es el de mantener ciertas composiciones especificadas de los productos. En ella se instalan cinco sistemas de control. Uno de ellos es empleado para fijar la presión de la columna, aplicando el control en el condensador. Dos sistemas son utilizados para verificar el inventario de líquido, controlando el nivel de vapor en el fondo de la columna y en el recipiente de reflujo. Los dos grados de libertad restantes pueden ser usados para conseguir la separación deseada, uno de los sistemas será para controlar el flujo que conseguirá la separación adecuada entre el destilado y la corriente de colas, mientras que el otro controlará la temperatura que permita obtener la composición deseada en uno de los productos. La temperatura suele emplearse como indicador de la composición. Este esquema de control se conoce como control de balances de materia, pues alcanzan la separación deseada aplicando estos balances en la columna (69).

Existen 120 combinaciones posibles de los cinco lazos de control principales de la columna. El esquema seleccionado para este proceso proporciona la respuesta más rápida a variaciones en la composición. Los lazos serán explicados uno a uno a continuación, siendo semejantes los de ambas columnas con condensador total. Por otro lado, las otras dos columnas, al contener un condensador parcial, presentan un grado de libertad diferente para su control. De esta manera, se hace necesario añadir un nuevo lazo de control de presión en el condensador.

Lazo de control 301

Este lazo tiene como finalidad controlar la presión en la columna de destilación T-301 para mantenerla en el valor deseado. Se trata de un lazo *feedback* en el que se mide la presión de la columna empleando el transmisor PT-301, cuyo valor medido es enviado al controlador PIC-301, el cual compara la presión deseada con la real y de acuerdo con el resultado dirige la válvula de control PV-301. Esta última regula el flujo de agua de refrigeración empleado en el condensador E-301, encargado de condensar parcialmente la corriente de vapor de cabezas de columna. Cuando la presión es demasiado alta, es posible disminuirla condensando una mayor cantidad de flujo, al aumentar el caudal de refrigerante.

Lazo de control 302

Como fue adelantado previamente, el condensador de la torre T-301 es parcial, por lo tanto, a su salida se obtendrá un producto consistente en una mezcla de líquido y vapor, el cual será separado

en el tanque V-301. En este recipiente es fundamental regular la presión, por lo que se instalará un lazo *feedback* que mida la presión en el tanque con un transmisor PT-302 y envíe la información al controlador PIC-302, instrumento que modificará la variable manipulada a través de la válvula PV-302. En este caso, la variable manipulada es el caudal de vapor a la salida del recipiente, el cual será incrementado cuando la presión sufra un aumento deseado e inversamente se disminuirá cuando la presión baje de su valor óptimo.

Lazo de control 303

En el recipiente V-301 se hace fundamental controlar el nivel de líquido regulando el caudal de reflujo a la columna T-301. Esta será la variable manipulada en el lazo *feedback* que se establece, la cual es regulada mediante la válvula LV-303, después de recibir una señal de controlador LIC-301 que le ordena abrir o cerrar de acuerdo con el dato de nivel recibido desde el LT-303, transmisor de nivel. A mayor nivel observado, se abrirá más la válvula para dejar pasar un mayor caudal de reflujo.

Lazo de control 304

Es posible controlar la temperatura en la columna de destilación T-304, con la finalidad de conseguir las especificaciones de producto deseadas, pues este parámetro tiene una estrecha relación con la composición. De esta manera, un lazo *feedback* se instalará para controlar la temperatura en un punto de la columna. El sensor deberá ser localizado en la posición de la columna donde la tasa de cambio de temperatura con la composición sea máxima, y su lectura será enviada por el transmisor TT-304 al controlador TIC-304. La variable manipulada será el caudal de vapor de media presión que entrará en la caldera y se modificará con la válvula de control TV-304, según las indicaciones que reciba del controlador. Si la temperatura medida presenta un valor menor al punto de consigna, se alimentará más caudal de fluido calefactor con el fin de devolver el sistema al valor óptimo.

Lazo de control 305

En toda columna de destilación es necesario mantener el inventario de líquido en el fondo en valores controlados, y así evitar que se produzca una inundación o vaciado que alteren el funcionamiento del equipo. Para esto, en la columna T-301 se lleva a cabo un control con un lazo *feedback*, con el que se pueda manipular el caudal del producto de colas. El lazo consta de un sensor de nivel, LT-305 que transmite la información al controlador LIC-305 para que este la compare con el punto de consigna y envíe una orden de actuación a la válvula de control LV-305, la cual se abrirá cuando el nivel sobrepase el valor deseado y se cerrará cuando este parámetro disminuya más de lo necesario.

Lazo de control 308

Este lazo, implementado en la columna de destilación T-302, es equivalente al lazo 301, pues con él se pretende controlar la presión en la torre mediante variaciones en el caudal de refrigerante. Los elementos pertenecientes al sistema son el transmisor PT-308, el controlador PIC-308 y la válvula PV-308.

Lazo de control 309

La columna de destilación T-302 también contiene un condensador parcial, por lo que esta ha de tener un control de presión en el tanque V-302 a través de la manipulación del caudal de vapor de destilado, tal y como se realiza en el lazo de control 302 para la columna T-301. Los elementos de este lazo son el transmisor PT-309, el controlador PIC-309 y la válvula de control PV-309.

Lazo de control 310

El próximo lazo de control de la columna de destilación T-302 consiste en el mantenimiento de un nivel apropiado de líquido en el tanque V-302, tal y como se observó en el lazo 303. De esta manera, se controla el nivel medido con el transmisor LT-310 a través del controlador LIC-310 y la válvula de control LV-310 modifica el caudal de reflujo a la columna.

Lazo de control 311

Este lazo consiste en el control de temperatura de la columna T-302 con la finalidad de conseguir la composición deseada de los productos. Este lazo tiene el mismo fundamento que el 304, perteneciente a la columna T-301. Sus elementos son el transmisor TT-311, el controlador-indicador TIC-311 y la válvula de control TV-311.

Lazo de control 312

El último lazo de control correspondiente a la columna de destilación T-302 pretende regular el nivel de líquido en el fondo de la torre, de la misma manera que se llevaba a cabo con el lazo 305 en la columna previa. Los elementos de control son la válvula LV-312, el controlador LIC-312 y el transmisor LT-312.

Lazo de control 315

Este lazo de presión sigue el mismo principio de control que el descrito en el lazo 204 para el compresor C-201. El transmisor PT-315 envía la señal de la medida de presión de la corriente de salida del compresor C-301 al controlador PIC-315. Este último elemento, si detecta una presión inferior al valor de consigna, ordena un incremento en la apertura de la válvula PV-315, aumentando el caudal de vapor recirculado a la entrada del equipo. De darse una presión superior, la válvula reduciría su apertura con el fin de retornar el sistema al valor deseado de presión.

Lazo de control 316

El lazo 316 se emplea para el control de la presión en la sección de cabezas de la columna T-303 donde se realiza la purificación del óxido de propileno para que cumpla con los requerimientos de pureza marcados. Es, por tanto, de vital importancia mantener la presión en los valores adecuados dado que esto marcará la composición del destilado obtenido. Se opta por un lazo *feedback* que funcionará de forma análoga a los lazos 301 y 308, empleados en las columnas T-301 y T-302 respectivamente. Siendo PT-316 el transmisor del valor medido de la presión y PIC-316 el controlador que, de ser necesario, enviará la orden de actuar a la válvula VLV-316, responsable de regular el caudal de refrigerante empleado en el condensador E-305.

Lazo de control 317

La torre T-303 es la primera de las columnas con un condensador parcial, por lo tanto, el nivel de líquido en el tambor de reflujo deberá ser controlado manipulando el caudal de destilado que sale de la columna. Para ello, se lleva a cabo un control de nivel similar al indicado en lazos anteriores, donde el nivel es medido con un sensor LT-317 y verificado por el controlador LIC-317, el cual envía una señal a la válvula LV-317, para que abra o cierre de acuerdo con el actual valor del parámetro medido. Cuando se detecta un nivel mayor al establecido como *set-point*, se abrirá la válvula para permitir el paso de mayor cantidad de líquido hacia el destilado con el fin de devolverlo a su valor óptimo.

Lazo de control 318

A diferencia de las columnas de destilación T-301 y T-302, las cuales emplean condensadores parciales, la purificadora de PO utiliza un condensador total para realizar el cambio de fase completo del vapor que sale por cabezas. Puesto que el control del nivel del tanque se emplea para manipular el caudal de destilado de la corriente 21, se hace necesario la instalación de un lazo que controle el flujo que es recirculado a la torre de destilación, pues es imprescindible corregir cualquier desviación que pueda surgir para mantener la relación de reflujo en el valor óptimo.

Por consiguiente, se opta por la utilización de un lazo *feedback*, integrado por el transmisor de flujo FT-308, encargado del envío de la señal correspondiente a la medida de la variable controlada (el caudal del reflujo) al controlador e indicador FIC-108. Este último elemento compara la información recibida con el punto de consigna y marca la actuación de la válvula de control FV-318, a través de la cual se manipula el flujo reintroducido a la torre de purificación de óxido de propileno.

Lazo de control 319

En la columna T-303 se realiza un control de temperatura equivalente al aplicado en las dos columnas de destilación anteriores (lazos 304 y 311), pues esta se mide en el punto de la torre cuya variación de temperatura sea mayor con la composición con el sensor TT-319, y, dependiendo del dato conseguido, se modificará con la válvula de control TV-319 el caudal de vapor de media presión introducido en la caldera E-306, gracias a una orden enviada por el controlador TIC-319.

Lazo de control 320

Del mismo modo, el nivel en las colas de la columna T-303 será controlado con un lazo *feedback* análogo al empleado en las demás columnas de destilación (lazos 305 y 312), en el cual se manipulará la corriente de líquido que sale por debajo de la torre y funcionará como los otros lazos de nivel presentes en este proceso. Los elementos pertenecientes al lazo son el transmisor LT-320, el controlador LIC-320 y la válvula de control LV-320.

Lazo de control 322

El intercambiador de calor E-307 es de vital importancia para conseguir que la corriente de salida de la torre purificadora de PO, T-303 adquiera una temperatura adecuada para su entrada a la columna T-304. Por lo tanto, se hace necesario realizar un control de la temperatura de salida de este equipo para asegurar que se logra el valor deseado. Así, se propone instalar un lazo de control *feedback* en el que la variable de proceso es la temperatura, como fue mencionado anteriormente, y la variable manipulada es el caudal de refrigerante que se inserta en el intercambiador.

De esta manera, al medir con el transmisor TT-322 la temperatura de salida del fluido de proceso, y enviar la lectura al controlador TIC-322, es posible manipular la válvula TV-322 para que se abra o cierre según sea requerido. En el caso de que la temperatura sea más alta de lo deseado, el controlador ordenará la apertura de la válvula, con el fin de reducir el parámetro hasta el punto de consigna.

Lazo de control 323

El intercambiador de calor E-308 persigue el mismo objetivo que el E-307 y es empleado de forma análoga a este equipo, difiriendo en que se encarga del enfriamiento de la corriente de salida de la preseparatora T-301. De esta forma, se hace necesario el empleo de un lazo de control de temperatura que presentará la misma estructura que el lazo 322 y estará constituido por el transmisor TT-323, el controlador TC-323 y la válvula de control TV-323.

Lazo de control 324

Este es el primer lazo de control de la columna T-304, encargada de separar el metanol del agua residual. Como en todas las columnas previas, se requiere controlar la presión de la columna, por lo que se emplea un lazo de control equivalente a los lazos 301, 308 y 316. Este comprenderá tres elementos: el transmisor PT-324, el controlador PIC-324 y la válvula de control PV-324, la cual se encargará de manipular el caudal de agua de refrigeración en el condensador E-309.

Lazo de control 325

La columna de destilación metanol/agua emplea un condensador total en cabezas. Por tanto, el lazo de control del nivel en el tanque condensando será análogo al lazo de control 317, empleado en la torre de purificación de PO (T-304). Así, se emplea el transmisor LT-325 para el envío de la señal correspondiente a la medida del nivel en el tambor de reflujo al controlador LIC-325. El controlador comparará la información recibida con el valor de consigna y decidirá el grado de apertura de la válvula de control VLV-325, con la cual se manipula el flujo de destilado y que será recirculado a la sección 100.

Lazo de control 326

La necesidad del empleo de un lazo para el control del caudal de reflujo en una columna de destilación que emplea un condensador total se justifica en la explicación del lazo 318. Por consiguiente, en la torre T-304 se opta por utilizar una estructura de control análoga a la empleada en la purificadora de óxido de propileno y que estará constituida por el transmisor del caudal de reflujo FT-326, el controlador FC-326 y la válvula de control FV-326, responsable de la manipulación del caudal líquido reintroducido en la columna de destilación.

Lazo de control 327

De igual modo que en las tres columnas predecesoras, es de gran importancia un buen control de la temperatura en la torre de destilación T-304, pues a partir de este parámetro es posible conocer de forma indirecta las composiciones en el punto de medida. Así, se utiliza el mismo esquema de control que el descrito para el lazo 304. Se empleará como transmisor de temperatura el TT-327, como controlador e indicador el TIC-327. Con el objetivo de manipular el caudal de utilidad introducido en el *reboiler* E-310 se hace uso de la válvula VLV-307.

Lazo de control 328

Por último, la columna T-304 requiere el control del nivel del fondo de la torre, el cual se consigue modificando el flujo de la corriente de colas. Así, se implementará un sistema de control de nivel

igual a los lazos 305, 312 y 320 de las columnas anteriores, que contiene los siguientes elementos: transmisor LT-328, controlador LIC-328 y válvula de control LV-328.

10.6. Alarmas

Las alarmas se utilizan para alertar a los operadores de desviaciones en las condiciones del proceso que puedan resultar potencialmente peligrosas. Los instrumentos clave se equipan con interruptores y relés que, en caso de ser necesario, activarán señales visuales y audibles en los paneles de control.

Se decide la instalación en el reactor R-101 de una alarma de temperatura alta (TAH-102) debido a que las reacciones que tienen lugar en el lecho catalítico son de carácter exotérmico y, por consiguiente, de producirse alguna interrupción o fallo en el sistema de refrigeración la temperatura del reactor podría aumentar rápidamente produciéndose un embalamiento térmico (comúnmente conocido en inglés como *thermal runaway*) y poniendo en peligro la seguridad de la instalación y los operarios. Asimismo, se opta por establecer una alarma de presión diferencial (PDAH-102) con el fin de alertar de una posible obstrucción que impida el correcto flujo de la mezcla reaccionante y poder actuar para solventar dicho problema.

En ambos separadores flash se instala una alarma de presión alta y otra de nivel alto, de esta forma se alerta en caso de producirse un bloqueo en las corrientes de salida del vapor o del líquido, respectivamente. En el flash V-201 se colocan las alarmas PAH-201 y LAH-202 y para el flash V-202 se establecen la PAH-207 y la LAH-206.

Igualmente, en las columnas de destilación se implementan alarmas en caso de detectar una presión en la columna más alta o más baja de lo normal, así como alarmas de nivel en la base de la torre, tanto por encima o por debajo del rango óptimo. La presión alta puede ser provocada por un fallo en el refrigerante del condensador, lo cual sería realmente peligroso. Del mismo modo, el nivel es un indicador de fallos en el flujo de entrada o de salida de la torre, o incluso en la corriente de reflujo, por lo que es un parámetro clave, cuyas alarmas podrán avisar acerca de defectos en el funcionamiento del equipo.

10.7. Válvulas de alivio

En todo equipo en el que se opere con fluidos volátiles y gaseosos o a altas presiones, se ha de instalar una válvula que permita aliviar el recipiente de forma segura en caso de producirse una sobrepresión indeseada que pueda perjudicar la correcta operación del proceso o incluso provocar consecuencias negativas referentes a la seguridad de operarios y del proceso.

De esta manera, se propone instalar válvulas de alivio en todos los equipos presentados en la Tabla 15, donde se puede observar, además, la nomenclatura asignada para cada una de ellas.

Tabla 15. Localización de las válvulas de alivio en el proceso

Equipo	Válvula de alivio
Reactor R-101	PSV-103
Flash V-201	PSV-203
Flash V-202	PSV-208
Columna T-301	PSV-306
Recipiente V-301	PSV-307
Columna T-302	PSV-313
Recipiente V-302	PSV-314
Columna T-303	PSV-321
Columna T-304	PSV-329

Asimismo, en el *Anexo II: Cálculos justificativos*, a modo de ejemplo, se llevará a cabo el dimensionamiento de las válvulas de alivio PSV-103 y PSV-329, correspondientes a las unidades que serán diseñadas de forma rigurosa.

11. SEGURIDAD

11.1. Introducción

Todos los procesos de manufactura son, en cierta medida, peligrosos. Sin embargo, en la industria química existen peligros adicionales asociados a los productos manejados y a las condiciones de operación en que son llevados a cabo. Esto conlleva a adoptar estrictas medidas en términos de seguridad con el fin de reducir o, de ser posible, anular el peligro a la hora de manejar las instalaciones. Puesto que en la Planta de Producción de Óxido de Propileno se trabaja con sustancias potencialmente peligrosas es necesario proceder a la elaboración de un estudio de seguridad cuyo alcance se corresponde con lo exigido en la rúbrica.

En este segmento se llevará a cabo un inventario de las sustancias presentes en el proceso, a partir de los datos encontrados en las fichas de seguridad de cada una de ellas. Además, se clasificará la planta según la directiva Seveso III, se aplicará un estudio de reactividad descontrolada detallando la matriz de incompatibilidad química, se determinarán las distancias mínimas de seguridad entre todos los equipos y entre las distintas áreas de la instalación y, finalmente, se realizará un estudio de los riesgos que pueden existir en planta relacionados con los equipos clave en cuestión de seguridad del proceso mediante el cálculo del índice de fuego y explosión DOW.

11.2. Ámbito jurídico

Las normas relativas a la prevención de accidentes graves donde intervienen sustancias peligrosas se recogen a nivel comunitario en la Directiva 2012/18/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, conocida también como Directiva Seveso III. Esta fue traspuesta al ámbito jurídico español en el Real Decreto 840/2015, de 21 de septiembre, por el que se aprueban

medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas.

Por otro lado, el reglamento (CE) nº 1907/2006 (denominado REACH, acrónimo de Registro, Evaluación, Autorización y Restricción de sustancias y mezclas químicas) entró en vigor el 1 de junio de 2007 y su objetivo es la mejora de la protección para la salud humana y el medio ambiente frente al riesgo que puede conllevar la fabricación, comercialización y uso de las sustancias y mezclas químicas. Posteriormente fue modificado por el reglamento (UE) nº 453/2010 de la Comisión de 20 de mayo de 2010.

En el REACH se establecen los procedimientos empleados para recopilar y valorar la información de propiedades y peligros de las diferentes sustancias químicas. Con el fin de clasificar la instalación de acorde con la Directiva Seveso III es necesario la realización de un inventario de sustancias.

11.3. Inventario de sustancias

Para su elaboración se hace uso de las fichas de datos de seguridad dado que son un método que facilita la información sobre sustancias y mezclas en la Unión Europea. Estas fichas se destinan tanto a los trabajadores que manipulan las sustancias como a los responsables del área de seguridad y, según lo establecido en el Artículo 31, deben ser facilitadas al destinatario por parte del proveedor. La guía para su elaboración viene definida en el Anexo II del Reglamento REACH y se encuentran divididas en dieciséis secciones. En este apartado se hará uso de la información aportada en la sección 2, donde se identifican los peligros y en la sección 3, donde se presenta la información sobre los componentes.

A continuación, en la Tabla 16 se expondrá el inventario de sustancias, considerando las propiedades relevantes para la seguridad de la planta definidas en las fichas REACH de cada uno de los compuestos empleados en la Planta de HPPO, las cuales se presentan en el *Anexo IV* de esta Memoria y se recogen en el Archivo II del presente proyecto. Estas pueden ser definidas como (70):

- Punto de destello: Es la temperatura mínima a la cual un líquido inflamable desprende suficiente vapor para formar una mezcla inflamable con el aire que rodea la superficie del líquido o en el interior del recipiente empleado.
- Límites de Inflamabilidad: Definen las concentraciones mínimas (LII) y máximas (LSI) del vapor o gas en mezcla con el aire, en las que son inflamables. Se expresan en tanto por ciento del volumen de mezcla vapor de combustible-aire.

El inventario de sustancias considera los siguientes compuestos: propileno, peróxido de hidrógeno, óxido de propileno, agua, propilenglicol y oxígeno.

Tabla 16. Propiedades físicas y químicas. Fuente: Fichas de seguridad







	Punto de ebullición a 1 atm, °C	Punto de destello a 1 atm, °C	LII, % volumen	LSI, % volumen
Propileno	-48	No aplica	2	11
Metanol	65	9,7	5,5	44
Óxido de Propileno	34,23	-38	2,1	36
Peróxido de Hidrógeno	114	No inflamable	-	-
Propilenglicol	189	103	2,6	12,6
Oxígeno	-183	No aplica	-	-
Agua	100	No inflamable	-	-

En el Reglamento (CE) nº 1272/2008 sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas (también conocido como Reglamento CLP, por sus siglas en inglés) que entró en vigor en enero de 2009, se presentan los pictogramas de peligro y las indicaciones de peligro (frases H) de los diferentes compuestos químicos. Cabe mencionar que el Reglamento CLP y el REACH van de la mano, pues su objetivo es informar sobre los peligros de las sustancias y mezclas químicas.

Del mismo modo, el Real Decreto 840/2015 fue publicado con el fin de transponer a nivel español la Directiva europea Seveso III, este será empleado para clasificar las sustancias de acuerdo con las categorías de peligro en las que estén incluidas.

En la Tabla 17 se sintetiza e integra de una forma efectiva toda esta información, en la que se incluyen los pictogramas de peligro, la categoría de peligro Seveso de las sustancias y las indicaciones de peligro para cada uno de los compuestos presente en el inventario de sustancias (71).

Tabla 17. Información sobre la peligrosidad de las sustancias de acuerdo con el Reglamento CLP y la Directiva Seveso III. Fuente: Fichas de seguridad

	Pictogramas	Frases H	Clasificación Seveso III
Propileno		H220: Gas extremadamente inflamable. H280: Contiene gas a presión. Peligro de explosión en caso de calentamiento.	P2
Metanol		H225: Líquido y vapores muy inflamables. H310+H311+H331: tóxico en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación. H370: Provoca daños en los órganos.	Nominada, H2, H3, P5a, P5b, P5c
Óxido de Propileno		H224: Líquido y vapores extremadamente inflamables. H302+H312+H332: Nocivo en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación. H315: Provoca irritación cutánea. H319: Provoca irritación ocular grave. H335: Puede irritar las vías respiratorias. H340: Puede provocar defectos genéticos. H350: Puede provocar cáncer.	Nominada, P5a
Peróxido de Hidrógeno		H272: Puede agravar un incendio; comburente. H302+H332: Nocivo en caso de ingestión o inhalación. H314: Provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves. H335: Puede irritar las vías respiratorias. H412: Nocivo para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.	P8
Propilenglicol		H319: Provoca irritación ocular grave.	No clasificada
Oxígeno		H270: Puede provocar o agravar un incendio; comburente. H280: Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento.	Nominada, P4
Agua	-	-	No clasificada

11.4. Clasificación de la instalación según Directiva Seveso

Para proceder a la clasificación de la instalación según la Directiva Seveso se sigue el R.D. 840/2015. Las disposiciones de este Real Decreto se aplicarán a los establecimientos definidos en el Artículo 3 como “la totalidad del emplazamiento bajo el control de un industrial en el que se encuentren sustancias peligrosas en una o varias instalaciones, incluidas las infraestructuras o actividades comunes o conexas; los establecimientos serán de nivel inferior o de nivel superior”. La planta de producción de óxido de propileno puede ser considerada como establecimiento dado

que no figura dentro de las excepciones recogidas en el Artículo 2, donde se hace referencia al ámbito de aplicación.

Las dos tipologías de establecimiento se diferencian con base en la cantidad de sustancias peligrosas que haya presentes en ellos y se definen como:

- Establecimientos de nivel inferior (NI): un establecimiento en el que haya presentes sustancias peligrosas en cantidades iguales o superiores a las especificadas en la columna 2 de la parte 1 o de la parte 2 del anexo I (denominadas requisitos de nivel inferior), pero inferiores a las cantidades especificadas en la columna 3 de la parte 1 o de la parte 2 del anexo I (denominadas requisitos de nivel superior). Todo ello empleando, cuando sea aplicable, la regla de la suma de la nota 4 del anexo I.
- Establecimientos de nivel superior (NS): un establecimiento en el que haya presentes sustancias peligrosas en cantidades iguales o superiores a las especificadas en la columna 3 de la parte 1 o de la parte 2 del anexo I, en otras palabras, que igualen o superen los valores establecidos en los requisitos de nivel superior. Todo ello empleando, cuando sea aplicable, la regla de la suma de la nota 4 del anexo I.

En la nota 4 del anexo I se especifica que “en el caso de que en un establecimiento no esté presente ninguna sustancia peligrosa en cantidad igual o superior a la cantidad umbral correspondiente, se aplicará la siguiente regla para determinar si son aplicables a dicho establecimiento los requisitos pertinentes de este real decreto”. Dado que para el presente caso sí existirán sustancias que superen los límites umbrales (como se muestra en la Tabla 18), dicha regla no será aplicada.

De la información recogida en la Tabla 17, se conoce que en la clasificación Seveso III no entran en consideración el agua ni el propilenglicol. Con el fin de proceder a la clasificación de la instalación, en la Tabla 18 se presentan las cantidades umbrales para cada uno de los compuestos que son almacenados. Para las sustancias nominadas (metanol, óxido de propileno y oxígeno) se emplean los umbrales recogidos en la parte II del anexo I, mientras que para las restantes (peróxido de hidrógeno y propeno) se hará uso de los umbrales de la parte I del anexo I.

Siguiendo la nota 3 del mismo anexo donde se establece que “las cantidades que hay que tener en cuenta para la aplicación de los artículos pertinentes son las máximas que estén presentes, o puedan estarlo, en un momento dado”, se considera como cantidad máxima para cada uno de los compuestos la correspondiente a un período de almacenaje de 72 horas. Sin embargo, para el caso del oxígeno, este no es almacenado y, por consiguiente, se empleará la cantidad máxima que exista de esta sustancia durante la operación del proceso.

Tabla 18. Clasificación de las sustancias peligrosas según Directiva Seveso III

	Requisito de Nivel Inferior (ton)	Requisito de Nivel Superior (ton)	Cantidad máxima (ton)	¿Aplica Seveso III?
Propileno	10	50	1420	Sí. NS
Metanol	500	5000	4,22	No
Óxido de Propileno	5	50	1363,64	Sí. NS
Peróxido de Hidrógeno	50	200	1363,92	Sí. NS
Oxígeno	200	2000	9,86	No

Finalmente, es posible determinar que la instalación de producción de óxido de propileno se clasifica como un Establecimiento de Nivel Superior, por lo que está en la obligación de enviar una notificación al órgano competente de la comunidad autónoma donde radique toda la información relevante acerca del establecimiento y de las sustancias peligrosas involucradas. Del mismo modo, se deberá elaborar un informe de seguridad que demuestre que se ha establecido una política de prevención de accidentes graves, que se han identificado y evaluado los riesgos de accidentes, entre otros aspectos indicados en el Real Decreto en cuestión.

11.5. Estudio de reactividad química descontrolada

Dentro de la seguridad industrial de las plantas químicas resulta de gran relevancia el conocimiento de los riesgos que tienen como origen las reacciones químicas indeseadas o incontroladas. La estrategia para la caracterización de las reacciones descontroladas sigue una secuencia que explora los sistemas reactivos en los siguientes pasos: i) descomposición térmica de todos los reactantes y productos, ii) reacción indebida de productos y reactantes con el agua y iii) reacción indebida de productos y reactantes con el aire (72).

A continuación, se llevará a cabo un análisis de la reactividad de las sustancias con el fin de determinar la posible existencia de reacciones peligrosas en la instalación. Para esto, será empleado un *software* ofrecido por la AIChE denominado *Chemical Reactivity Worksheet* (CRW4). Este proporciona, entre otros servicios, la posibilidad de descargar un cuadro de reactividades binarias entre cada par de compuestos presentes que especifica el peligro que representan.

11.5.1. Clasificación NFPA

La NFPA (*National Fire Protection Association*) es una organización sin ánimos de lucro dedicada a eliminar las muertes, daños y pérdidas económicas y de la propiedad debidas a los peligros relacionados con el fuego. Esta desarrolló la norma NFPA 704 para la identificación de peligros en sustancias, la cual indica un sistema sencillo y comprensible para conocer de forma global los peligros relacionados con cada sustancia y su gravedad.

El identificador consiste en un rombo dividido en cuatro partes de distintos colores, tal y como se puede observar en la Figura 37. El color azul representa el peligro para la salud, el rojo es usado para peligro de inflamabilidad y el amarillo para peligro de inestabilidad. Se indicará, además, el grado de gravedad con una escala numérica desde 0, que representa el peligro mínimo, hasta 4, siendo el más grave (73). En el lado izquierdo de la Figura 38 es presentada la clasificación NFPA de todos los compuestos presentes en el estudio con sus correspondientes números indicadores de la gravedad.

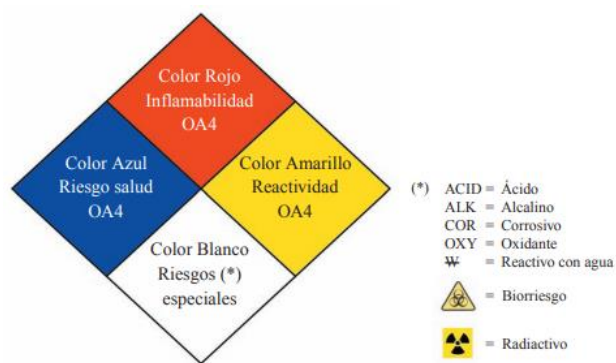


Figura 37. Diamante de fuego propuesto por la NFPA. Fuente: (72)

11.5.2. Matriz de compatibilidad química

En la Figura 38 se muestra la matriz de compatibilidad entre los diferentes compuestos que fueron presentados anteriormente en el inventario de sustancias. Esta fue elaborada haciendo uso del *software* CRW4.

Y : Compatible	N : Incompatible
C : Caution	SR : Self-Reactive
*: Changed by user	

NFPA				HPPO Compatibility Chart								HYDROGEN PEROXIDE, AQUEOUS SOLUTION, WITH NOT LESS THAN 20% BUT NOT MORE THAN 80% BY WEIGHT	METHANOL	OXYGEN	PROPYLENE	PROPYLENE GLYCOL	PROPYLENE OXIDE	WATER
Health	Flammability	Instability	Special															
3	0	1	Oxi	HYDROGEN PEROXIDE, AQUEOUS SOLUTION, WITH NOT LESS THAN 20% BUT NOT MORE THAN 80% BY WEIGHT														
1	3	0		METHANOL	N													
3	0	0	Oxi	OXYGEN	N	N												
1	4	1		PROPYLENE	N	Y	N											
0	1	0		PROPYLENE GLYCOL	N	Y	N	Y										
3	4	2		PROPYLENE OXIDE	N	N	N	C	N	SR								
				WATER	N	Y	N	Y	Y	C								

Figura 38. Matriz de compatibilidad química. Fuente: elaboración propia a partir del *software* CRW4

La leyenda de la simbología empleada se muestra en la Tabla 19.

Tabla 19. Leyenda de la matriz de compatibilidad. Fuente: elaboración propia

Símbolo	Significado
Y	Compatible: no se esperan peligros de reactividad
N	Incompatible: se esperan peligros de reactividad
C	Precaución: puede ser peligroso en ciertas condiciones
SR	Reacción consigo mismo: potencialmente autorreactivo

Es posible observar cómo existen incompatibilidades entre algunos compuestos del proceso, pudiendo desencadenar reacciones peligrosas.

El oxígeno y el peróxido de hidrógeno son incompatibles con todas las demás sustancias, pues ambos son agentes oxidantes muy potentes. Así, para el caso del peróxido de hidrógeno, este solo se encontrará en contacto con los demás compuestos en un breve periodo de tiempo en el interior del reactor R-101. Para el caso del oxígeno, este se forma por la descomposición de una pequeña parte del peróxido en el interior del reactor e inmediatamente a su salida es separado para evitar cualquier reacción indeseada. Por estas razones dichas incompatibilidades son asumibles.

En el caso del óxido de propileno con el metanol, esta reacción fue considerada en la etapa de formulación del proceso, sin embargo, se determinó que era producida en muy pequeñas condiciones, por lo que se tornará despreciable.

Además, el óxido de propileno puede reaccionar consigo mismo dado que es polimerizable y, por tanto, su almacenamiento debe ser enfocado hacia la prevención de dicha reacción.

Del mismo modo, el óxido de propileno puede producir una reacción exotérmica con el propilenglicol, no obstante, en este proceso se produce una cantidad minúscula de este último, y, por lo tanto, la reacción entre ellos se puede asumir que no representará ningún peligro importante.

A pesar de concluir que las reacciones no suponen un riesgo significativo para la operación normal de la planta, como consecuencia de la alta reactividad de varias de las sustancias presentes en el proceso, será necesario llevar un control estricto de las condiciones de trabajo y del correcto funcionamiento de todos los equipos, con el fin de evitar cualquier desviación que pueda provocar escenarios peligrosos que conduzcan a poner en juego la seguridad en la instalación.

11.6. Distancias de seguridad

Con el fin de establecer una distancia adecuada en términos de seguridad entre los distintos equipos presentes en la instalación se emplea una guía GAP 2.5.2 para el espaciado y el *layout* de plantas químicas proporcionada por GAPS (*Global Asset Protection Services LLC*) (74). En las Figura 39 y Figura 40 se presentan las distancias mínimas recomendadas por dicha guía con las que se busca limitar los posibles daños ocasionados por incendios y explosiones. En específico,

el primero de los diagramas representa la distancia mínima que se debe mantener entre los distintos equipos de la planta, mientras que en el segundo se indica el espaciado entre los diversos bloques de la industria.

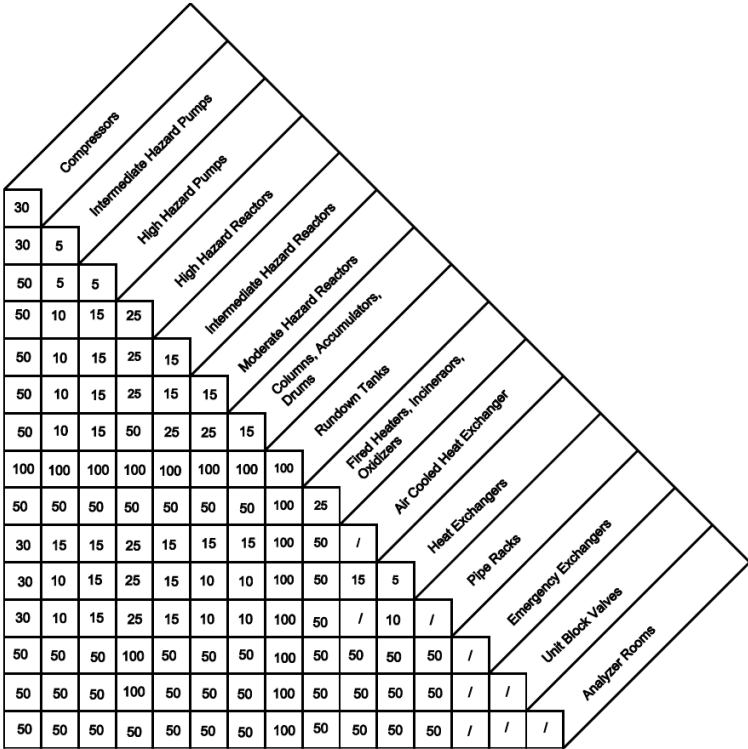


Figura 39. Recomendaciones de espaciado entre equipos. Fuente: (74)

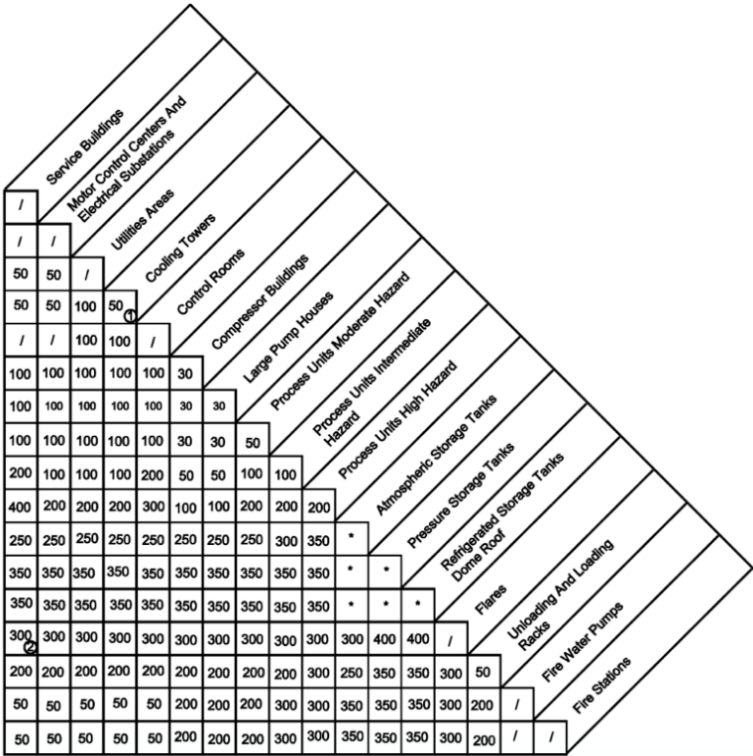


Figura 40. Recomendaciones de espaciado entre bloques. Fuente: (74)

Acorde con lo expuesto anteriormente, en la Tabla 20 se muestra la distancia mínima de separación por seguridad entre los diferentes equipos presentes en la Planta de HPPO. Cabe mencionar que, de considerarlo apropiado, estas distancias se pueden incrementar.

Tabla 20. Distancias mínimas de seguridad en la Planta de PO en metros. Fuente: elaboración propia a partir de (74)

Distancia mínima, m	P-101 A/B	E-101	R-101	V-201	C-201	E-201	V-202	P-201 A/B	C-301	T-301	T-302	T-303	E-307	E-308	T-304
E-101	3,05														
R-101	3,05	7,63													
V-201	3,05	3,05	15,25												
C-201	9,15	9,15	15,25	15,25											
E-201	3,05	1,53	7,63	3,05	9,15										
V-202	3,05	3,05	15,25	4,58	15,25	3,05									
P-201 A/B	1,53	3,05	3,05	3,05	9,15	3,05	3,05								
C-301	9,15	9,15	15,25	15,25	9,15	9,15	15,25	9,15							
T-301	3,05	3,05	15,25	4,58	15,25	3,05	4,58	3,05	15,25						
T-302	3,05	3,05	15,25	4,58	15,25	3,05	4,58	3,05	15,25	4,58					
T-303	3,05	3,05	15,25	4,58	15,25	3,05	4,58	3,05	15,25	4,58	4,58				
E-307	3,05	1,53	7,63	3,05	9,15	1,53	3,05	3,05	9,15	3,05	3,05	3,05			
E-308	3,05	1,53	7,63	3,05	9,15	1,53	3,05	3,05	9,15	3,05	3,05	3,05	1,53		
T-304	3,05	3,05	15,25	4,58	15,25	3,05	4,58	3,05	15,25	4,58	4,58	4,58	3,05	3,05	
P-305 A/B	1,53	3,05	3,05	3,05	9,15	3,05	3,05	1,53	9,15	3,05	3,05	3,05	3,05	3,05	3,05

En definitiva, múltiples aspectos han de ser considerados al momento de decidir la disposición de la planta, con la finalidad de reducir el efecto de los factores controlables e incontrolables que contribuyen a la provocación de accidentes, tales como los parámetros de diseño del proceso, el mantenimiento, las fuentes de ignición, la exposición a peligros naturales, la dirección del viento y el clima. De esta manera, siguiendo las indicaciones realizadas en la guía GAP.2.5.2, se lleva a cabo el plano de distribución (*layout*) de las distintas áreas y equipos pertenecientes a la industria en cuestión.

11.7. Índice DOW de fuego y explosión

El índice DOW de fuego y explosión, abreviado como índice de F&E, ha sido empleado por muchos años como un indicador que proporciona un valor relativo al riesgo de una unidad individual de un proceso referido a las pérdidas debidas a incendios y explosiones (75). Su propósito es servir como guía para la selección de los métodos de protección contra incendios y permitir el ordenamiento de los distintos equipos de una planta según su riesgo individual.

Se trata de un sistema creado por *Dow Chemical Company* y publicado por el Instituto Americano de Ingenieros Químicos. Tiene como objetivo cuantificar, en términos realísticos, el daño esperado en caso de un potencial fuego, una explosión o bien incidentes debidos a la reactividad. Además, busca identificar aquel equipamiento que contribuiría a la creación o propagación de un incidente. Por último, pretende comunicar el riesgo potencial vinculado a dicho índice con el fin

de una gestión efectiva. Es de gran utilidad estimar el valor de este índice en una etapa temprana del diseño del proceso, pues servirá para conocer si debe ser considerada una alternativa a la ruta del proceso seleccionada menos peligrosa.

A continuación, se llevará a cabo un análisis elemental de los riesgos asociados a los dos equipos de la planta de HPPO que son diseñados de manera rigurosa: el reactor R-101 y la columna de destilación metanol/agua T-304. Para ello se seguirá un método cuantitativo basado en el índice DOW. También será estimada el área de exposición para cada uno de los respectivos equipos y el factor de daño. El procedimiento para la determinación del índice de cada equipo se detalla a continuación:

- 1) Selección de las unidades pertinentes de proceso en lo relativo a la magnitud de un potencial incendio o explosión.
- 2) Determinación del factor del material (FM) para cada uno de los equipos seleccionados.
- 3) Cálculo del factor de riesgos generales del proceso (F_1) aplicando las penalidades adecuadas.
- 4) Cálculo del factor de riesgos especiales del proceso (F_2) considerando las penalidades.
- 5) Obtención del factor de riesgos de la unidad (F_3) al realizar el producto de estos los factores anteriores.
- 6) Cálculo del índice DOW de fuego y explosión a partir de la multiplicación realizada entre F_3 y el factor del material.
- 7) Determinación del área de exposición alrededor del equipo evaluado usando el radio de exposición.
- 8) Obtención del factor de daño.

11.7.1. Unidades pertinentes en el proceso

La selección de las unidades que serán analizadas se basa en un procedimiento lógico, pues se suelen escoger solo aquellas que puedan tener un impacto en materia de incendios y explosiones. Los factores más importantes por considerar son la energía potencial química (factor de material), la cantidad de material peligroso en la unidad, la presión y temperatura de operación, entre otros.

En este caso, se ha optado por realizar el análisis del índice DOW de fuego y explosión a las dos unidades diseñadas de forma rigurosa al conocer todos los parámetros del proceso necesarios: el reactor R-101 y la columna de destilación T-304.

11.7.2. Factor de material (FM)

Se trata del valor de partida en el cálculo del índice DOW y consiste en una medida de la tasa intrínseca de liberación de energía potencial al producirse un incendio o una explosión debido a una reacción química. Este valor será obtenido para cada sustancia pura del Apéndice A del documento de la bibliografía (75). En el Apéndice B se establece que para mezclas de materiales

se empleará como base el de mayor FM, siempre y cuando se encuentre en una concentración superior al 5%. Los factores de los distintos materiales considerados en ambas unidades en estudio se muestran a continuación entre paréntesis:

- Reactor R-101: **Óxido de Propileno** (24), Propileno (21), Metanol (16), Peróxido de H₂ (14).
- Columna T-304: **Metanol** (16).

Aquellos compuestos resaltados son los seleccionados como base del estudio para cada equipo.

11.7.3. Riesgos generales del proceso

Dentro de este grupo se engloban los factores que juegan un papel primario en la determinación de la magnitud de un incidente. Los seis ítems considerados en la presente sección como contribuidores al riesgo son aplicables a la gran mayoría de situaciones que se dan en los procesos. Para realizar la evaluación del riesgo lo más realista posible, la penalización seleccionada para cada factor debe ser aplicada bajo las condiciones de operación normales que conlleven el mayor peligro y que ocurran durante la asociación del coeficiente de material específico con el equipo que esté siendo analizado. A continuación, se presentan los factores tomados en consideración, cuya penalización será determinada siguiendo las pautas indicadas en la guía (75).

11.7.4. Riesgos especiales del proceso

Este grupo está formado por aquellos factores que, por la experiencia, se conoce que contribuyen a la probabilidad de que tenga lugar un incidente que conlleve a una explosión o un incendio. Existen doce ítems que se incluyen en esta sección y para los que se decide la penalidad correspondiente siguiendo las indicaciones marcadas por la guía (75).

- Material tóxico
- Presión subatmosférica
- Operación cercana al rango inflamable: líquidos inflamables almacenados en tanques, fallo en purga o perturbación del proceso, operación regular en rango inflamable.
- Explosión por polvo
- Presión
- Temperatura baja
- Cantidad de material inflamable/inestable: líquidos o gases en proceso, líquidos o gases almacenados o sólidos combustibles almacenados y polvo en proceso
- Corrosión y erosión
- Fugas: juntas y empaquetaduras
- Uso de equipos con llama
- Sistema de intercambio de calor con aceite caliente
- Equipo rotatorio

11.7.5. Hojas de cálculo

En la Tabla 21 y la Tabla 22 se muestran los formularios cubiertos con las diferentes penalizaciones seleccionadas para el cálculo de los índices de fuego y explosión del reactor R-101 y la columna T-304, respectivamente.

Tabla 21. Parámetros del índice de fuego y explosión DOW para el reactor R-101

ÍNDICE DE FUEGO Y EXPLOSIÓN		
País: España	Ubicación: Polígono Industrial Empresarium, Zaragoza	
Preparado por: Rodríguez Oreiro, A.A. Teixeira Taboada, S.	Revisado por: Rodríguez Oreiro, A.A. Teixeira Taboada, S.	Estado de la unidad de proceso: Diseño
Equipo: Reactor R-101	Sección: 100	Fecha: 3/06/2020
Materiales en la unidad del proceso:	H ₂ O ₂ , H ₂ O, CH ₄ O, C ₃ H ₈ O ₂ , C ₃ H ₆ O, C ₃ H ₆ , O ₂	
Material básico para el factor del material:	C ₃ H ₆ O (Óxido de propileno)	
FACTOR DE MATERIAL		24
1. RIESGOS GENERALES DEL PROCESO	Rango de Penalidad	Factor de Penalidad
Factor base	1	1
A. Reacciones químicas exotérmicas	0,3-1,25	0,5
B. Procesos endotérmicos	0,2-0,4	0
C. Manejo y transporte de material	0,25-1,05	0,85
D. Unidades de proceso encerradas o interiores	0,25-0,9	0
E. Acceso	0,2-0,35	0
F. Drenaje y control de derrames	0,25-0,5	0
FACTOR DE RIESGOS GENERALES DEL PROCESO (F₁)		2,35
2. RIESGOS ESPECIALES DEL PROCESO		
Factor base	1	1
A. Material(es) tóxico(s)	0,2-0,8	0,6
B. Presión subatmosférica	0,2-0,8	0
C. Operación cercana al rango inflamable () inertizada (X) sin inertizar		
1. Líquidos inflamables almacenados en tanques	0,5	0
2. Fallo en purga o perturbación del proceso	0,3	0,3
3. Operación regular en rango inflamable	0,8	0
D. Explosión por polvo	0,25-2	0
E. Presión	Presión de operación (barg): 27 Presión de alivio (barg): 32,68	0,53
F. Temperatura baja	0,2-0,3	0
G. Cantidad de material inflamable/inestable (kg en 10 min)	4260	
1. Líquidos o gases en proceso		0,17
2. Líquidos o gases almacenados		
3. Sólidos combustibles almacenados, Polvo en proceso		
H. Corrosión y erosión	0,1-0,75	0,1
I. Fuga. Juntas y empaquetaduras	0,1-1,5	0,1
J. Uso de equipos con llama		
K. Sistema de intercambio de calor con aceite caliente	0,15-1,15	0
L. Equipo rotatorio	0,5	0
FACTOR DE RIESGOS ESPECIALES DEL PROCESO (F₂)		2,8
FACTOR DE RIESGOS DE LA UNIDAD DEL PROCESO (F₁ x F₂ = F₃)		6,58
ÍNDICE DE FUEGO Y EXPLOSIÓN (F₃ x MF = F&EI)		158

Tabla 22. Parámetros del índice de fuego y explosión DOW para la columna T-304

ÍNDICE DE FUEGO Y EXPLOSIÓN		
País: España	Ubicación: Polígono Industrial Empresarium, Zaragoza	
Preparado por: Rodríguez Oreiro, A.A. Teixeira Taboada, S.	Revisado por: Rodríguez Oreiro, A.A. Teixeira Taboada, S.	Estado de la unidad de proceso: Diseño
Equipo: Columna de destilación T-304	Sección: 300	Fecha: 3/06/2020
Materiales en la unidad del proceso:	Metanol (CH ₄ O), agua (H ₂ O) y propilenglicol (C ₃ H ₈ O ₂)	
Material básico para el factor del material:	Metanol (CH ₄ O)	
FACTOR DE MATERIAL		16
1. RIESGOS GENERALES DEL PROCESO	Rango de Penalidad	Factor de Penalidad
Factor base	1	1
A. Reacciones químicas exotérmicas	0,3-1,25	0
B. Procesos endotérmicos	0,2-0,4	0
C. Manejo y transporte de material	0,25-1,05	0,85
D. Unidades de proceso encerradas o interiores	0,25-0,9	0
E. Acceso	0,2-0,35	0
F. Drenaje y control de derrames	0,25-0,5	0
FACTOR DE RIESGOS GENERALES DEL PROCESO (F₁)		1,85
2. RIESGOS ESPECIALES DEL PROCESO		
Factor base	1	1
A. Material(es) tóxico(s)	0,2-0,8	0,2
B. Presión subatmosférica	0,2-0,8	0
C. Operación cercana al rango inflamable () inertizada (X) sin inertizar		
1. Líquidos inflamables almacenados en tanques	0,5	0
2. Fallo en purga o perturbación del proceso	0,3	0,3
3. Operación regular en rango inflamable	0,8	0
D. Explosión por polvo	0,25-2	0
E. Presión	Presión de operación (barg): 0 Presión de alivio (barg): 2,22	0,13
F. Temperatura baja	0,2-0,3	0
G. Cantidad de material inflamable/inestable (kg en 10 min)	13269,72	
1. Líquidos o gases en proceso		0,17
2. Líquidos o gases almacenados		0
3. Sólidos combustibles almacenados, Polvo en proceso		0
H. Corrosión y erosión	0,1-0,75	0,1
I. Fuga. Juntas y empaquetaduras	0,1-1,5	0,1
J. Uso de equipos con llama		0
K. Sistema de intercambio de calor con aceite caliente	0,15-1,15	0
L. Equipo rotatorio	0,5	0
FACTOR DE RIESGOS ESPECIALES DEL PROCESO (F₂)		2,00
FACTOR DE RIESGOS DE LA UNIDAD DEL PROCESO (F₁ x F₂ = F₃)		3,70
ÍNDICE DE FUEGO Y EXPLOSIÓN (F₃ x MF = F&EI)		59

11.7.6. Grado de peligro

Los efectos de un incendio o una explosión debidos a la liberación de un material inflamable y su ignición son los cuantificados a partir de los formularios presentados anteriormente. La severidad del peligro asociado a un equipo en específico en cuanto a los incendios o explosiones se puede clasificar de forma cualitativa según su valor de acuerdo con la Tabla 23.

Tabla 23. Grado de peligro según el índice de fuego y explosión DOW. Fuente: (75)

RANGO DEL ÍNDICE DE F&E	GRADO DE PELIGRO
1-60	Ligero
61-96	Moderado
97-127	Intermedio
128-158	Grave
+159	Severo

A partir de esta es posible determinar que el grado de peligro del reactor R-101 es grave, pues su valor de índice de F&E es de 158. Por otro lado, el índice DOW de F&E de la columna resultó ser de 59, correspondiéndose con un grado de peligro ligero.

11.7.7. Radio y área de exposición

El radio de exposición resulta relevante para conocer el área alrededor del equipo considerada que podría ser dañada como consecuencia de una explosión o un incendio. Su cálculo se realiza para cada uno de los equipos multiplicando el índice DOW calculado anteriormente por un factor de 0,84. De esta forma se obtiene una distancia en pies que se convierte al Sistema Internacional de Unidades.

Posteriormente, a partir de dicho radio se obtiene el área correspondiente de un círculo, teniendo como origen el centro del equipo en cuestión, que corresponderá al área que podría verse afectada. Los cálculos obtenidos se muestran en el esquema dispuesto en la Figura 42.

11.7.8. Factor de daño

El factor de daño representa, para cada unidad del proceso, el efecto global de los daños causados por el fuego y el estallido resultantes de la liberación de energía causada por una reacción química, como, por ejemplo, una combustión. Este valor es determinado a partir del factor de riesgos de la unidad del proceso (F_3) y el factor de material (FM) empleando como guía la Figura 41. De esta forma se determinó que el factor de daño del reactor R-101 es de un 85%, mientras que para la columna T-304 resulta de 43%.

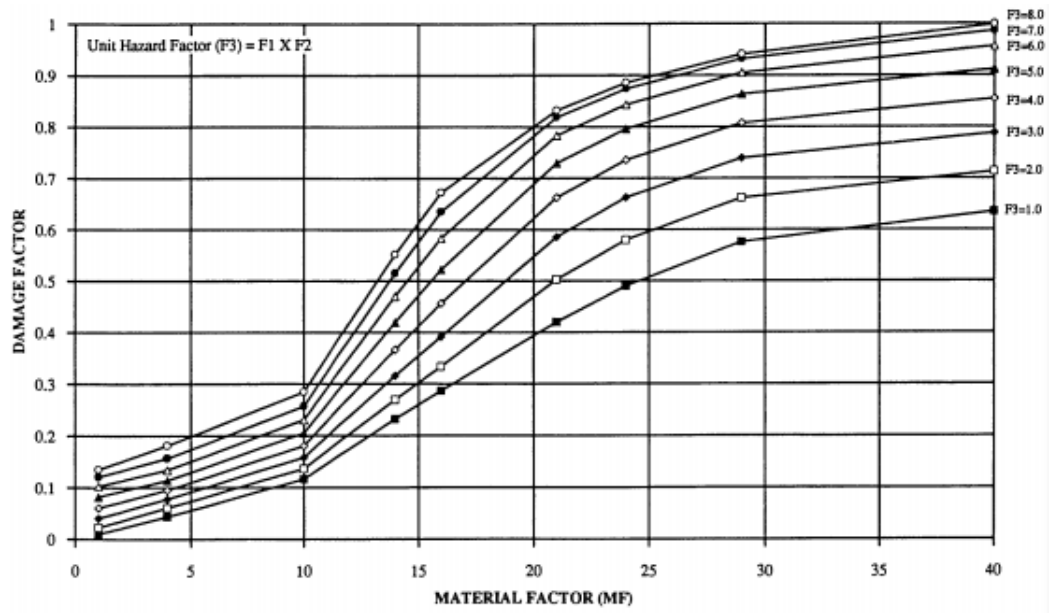


Figura 41. Factor de daño. Fuente: (75)

Finalmente, en la Figura 42 es posible observar un esquema que resume los parámetros calculados a partir del análisis realizado en este apartado, donde se aprecia una representación de lo que sería la zona afectada en caso de producirse un escenario de fuego o explosión.

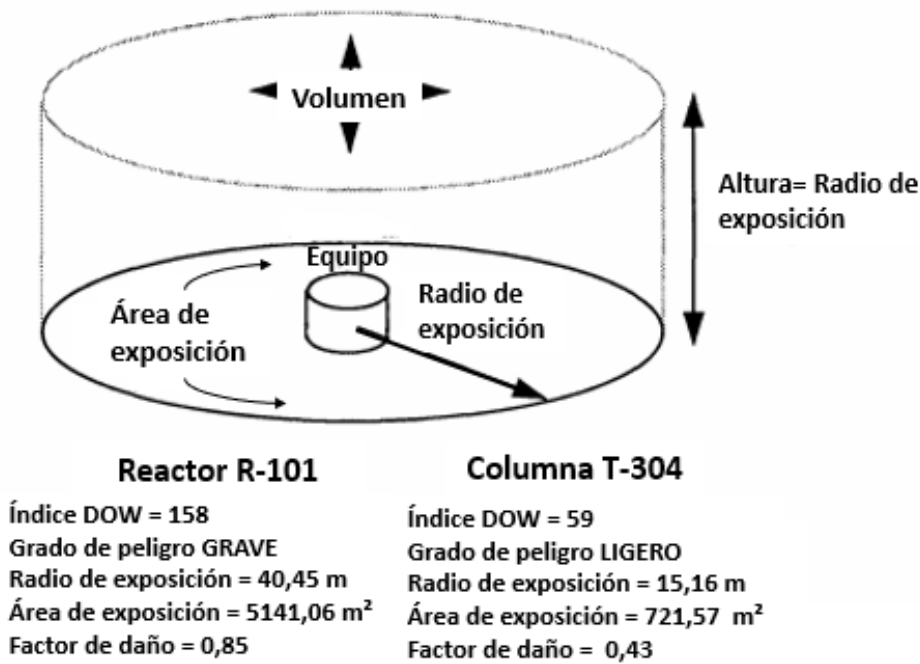


Figura 42. Resultados del análisis del índice DOW de fuego y explosión para la planta en cuestión.
Fuente: elaboración propia a partir de (75)

11.8. Diseño de las válvulas de alivio

Con la intención de proteger recipientes a presión de situaciones en las que se pueda generar sobrepresión en la operación es llevado a cabo el dimensionamiento y la selección de los

dispositivos de alivio de presión utilizados en la industria. Para ello, será realizado el dimensionamiento de las válvulas de alivio correspondientes a los equipos diseñados de manera rigurosa en este proyecto siguiendo las indicaciones del Estándar API 520 y de acuerdo con el Código ASME, Sección VIII. Este procedimiento será explicado en detalle en el *Anexo II* de este documento, *Cálculos justificativos*.

12. LEGISLACIÓN, NORMAS, REFERENCIAS Y CÓDIGOS DE DISEÑO

12.1. Legislación general

12.1.1. Ámbito comunitario

- Reglamento (CE) n o 765/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 9 de julio de 2008, por el que se establecen los requisitos de acreditación y vigilancia del mercado relativos a la comercialización de los productos y por el que se deroga el Reglamento (CEE).
- Directiva 2008/68/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de septiembre de 2008, sobre el transporte terrestre de mercancías peligrosas.

12.1.2. Ámbito nacional

- Real Decreto de 24 de julio de 1889 por el que se publica el Código Civil.
- Real Decreto 97/2014, de 14 de febrero, por el que se regulan las operaciones de transporte de mercancías peligrosas por carretera en territorio español.

12.2. Legislación sobre seguridad

12.2.1. Ámbito comunitario

- Reglamento (CE) n° 1907/2006 del Parlamento Europeo y del Consejo, relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de las sustancias y mezclas químicas (REACH).
- Reglamento (UE) 2016/425 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 9 de marzo de 2016, relativo a los equipos de protección individual y por el que se deroga la Directiva 89/686/CEE del Consejo.
- Reglamento (CE) n° 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas, y por el que se modifican y derogan las Directivas 67/548/CEE y 1999/45/CE y se modifica el Reglamento (CE) n° 1907/2006 (CLP).
- Reglamento (UE) n ° 649/2012 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos (PIC).
- Directiva 2012/18/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativa al control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias

peligrosas y por la que se modifica y ulteriormente deroga la Directiva 96/82/CE (Directiva Seveso III).

- Directiva 2014/34/UE del Parlamento Europeo y del Consejo de 26 de febrero de 2014 sobre la armonización de las legislaciones de los Estados miembros en materia de aparatos y sistemas de protección para uso en atmósferas potencialmente explosivas (refundición).
- Directiva 2006/42/CE del Parlamento Europeo y del Consejo de 17 de mayo de 2006 relativa a las máquinas y por la que se modifica la Directiva 95/16/CE (refundición).
- Directiva 1999/92/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 1999, relativa a las disposiciones mínimas para la mejora de la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores expuestos a los riesgos derivados de atmósferas explosivas.
- Directiva 2003/10/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 6 de febrero de 2003, sobre las disposiciones mínimas de seguridad y de salud relativas a la exposición de los trabajadores a los riesgos derivados de los agentes físicos (ruido).
- Directiva 92/58/CEE del Consejo, de 24 de junio de 1992, relativa a las disposiciones mínimas en materia de señalización de seguridad y de salud en el trabajo.

12.2.2. Ámbito nacional

- Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de prevención de Riesgos Laborales.
- Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en las obras de construcción.
- Real Decreto 840/2015, de 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas.
- Real Decreto 1196/2003, de 19 de septiembre, por el que se aprueba la Directriz básica de protección civil para el control y planificación ante el riesgo de accidentes graves en los que intervienen sustancias peligrosas.
- Real Decreto 656/2017, de 23 de junio, por el que se aprueba el Reglamento de Almacenamiento de Productos Químicos y sus Instrucciones Técnicas Complementarias MIE APQ 0 a 10.

12.3. Legislación sobre medioambiente

12.3.1. Ámbito comunitario

- Directiva 2010/75/EU del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de noviembre de 2010, sobre las emisiones industriales (prevención y control integrados de la contaminación).
- Directiva 2001/42/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 27 de junio de 2001, relativa a la evaluación de los efectos de determinados planes y programas en el medio ambiente.

- Directiva 2014/52/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de abril de 2014, por la que se modifica la Directiva 2011/92/UE, relativa a la evaluación de las repercusiones de determinados proyectos públicos y privados sobre el medio ambiente.
- Directiva 1999/31/CE del Consejo, de 26 de abril de 1999, relativa al vertido de residuos.
- Directiva 2002/49/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 25 de junio de 2002, sobre evaluación y gestión del ruido ambiental.
- Decisión 2006/507/CE del Consejo, de 14 de octubre de 2004, relativa a la firma, en nombre de la Comunidad Europea, del Convenio de Estocolmo sobre contaminantes orgánicos persistentes.

12.3.2. Ámbito nacional

- Ley 21/2013, del 9 de noviembre, de evaluación ambiental, tomando en cuenta las modificaciones establecidas en la Ley 9/2018, de 5 de diciembre con las que se transpone la Directiva 2014/52/UE del Parlamento Europeo y del Consejo.
- Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido.
- Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera.
- Real Decreto Legislativo 1/2001, de 20 de julio, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley de Aguas.
- Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire y modificado por el Real Decreto 678/2014, de 1 de agosto y posteriormente por el Real Decreto 39/2017, de 27 de enero.

12.3.3. Ámbito autonómico

- Ley 7/2010, de 18 de noviembre, de protección contra la contaminación acústica de Aragón.

12.4. Normas, guías y códigos de diseño

- Código ASME *Boiler and Pressure Vessel Code* (BPV)
- Normas DIN
- Estándar API 520
- Normativa TEMA
- Normas UNE
- Normas ISO
- Estándar ISA-5.1-1984
- Norma NFPA 704
- Guías GAP 2.5.2, para el Espaciado y *Layout* de Plantas Químicas y de Petróleo

13. BIBLIOGRAFÍA

1. **ULLMAN, Fritz.** *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*. 5ª edición. Michigan: VCH, 1988. págs. 211-259. ISBN: 3527201114.
2. **KIRK-OTHMER.** *Encyclopedia of Chemical Technology*. Segunda. Nueva York: John Wiley & Sons, Inc., 1968. págs. 579-607. Vol. 16. ISBN: 9780471485124.
3. **PIXELS.** *Propene molecule*. [En línea] [Citado el: 13 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://pixels.com/featured/1-propene-molecule-molekuul.html>.
4. **BOLIVAR, Gabriel.** LIDEFER. *Peróxido de hidrógeno (H₂O₂): estructura, propiedades, usos, obtención*. [En línea] [Citado el: 18 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://www.lifeder.com/peroxido-de-hidrogeno/>.
5. **O'CONNOR, Rhian.** Chemical Industry News and Analysis. *The PO problem*. [En línea] 3 de agosto de 2017. [Citado el: 6 de marzo de 2020.] <https://chemical-materials.elsevier.com/chemicals-industry-news-and-analysis/po-problem/>.
6. **McKETTA, John J.** *Encyclopedia of Chemical Processing and Design*. Nueva York: Marcel Dekker, Inc., 1993. págs. 88-115. Vol. 45. ISBN: 0-8247-2495-X.
7. **KAWABATA, Tomonori y YAMAMOTO, Jun.** *Trends and Views in the Development of Technologies for Propylene Oxide Production*. 2019. Vol. 2019.
8. **IHS MARKIT.** *Propylene Oxide: Chemical Economics Handbook*. [En línea] 2019. [Citado el: 10 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://ihsmarkit.com/products/propylene-oxide-chemical-economics-handbook.html>.
9. **NEXANT.** *Market Analytics: Propylene Oxide*. [En línea] Junio 2018. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.nexantsubscriptions.com/file/124030/download?token=lZiB7x4P>.
10. **MERCHANT RESEARCH & CONSULTING, LTD.** *Propylene Oxide (PO): 2020 World Market Outlook and Forecast up to 2029*. [En línea] 2020. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://mcgroup.co.uk/researches/propylene-oxide-po>.
11. **MANZ, Thomas A.** Selective oxidation passing through η³-ozone intermediates: Applications to direct propene epoxidation using molecular oxygen oxidant. *RSC Advances*. Junio de 2014, 4, págs. 27755–27774.
12. **TECHNAVIO.** *Global polyurethane foam market 2019-2023*. [En línea] 11 de julio de 2019. [Citado el: 12 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.businesswire.com/news/home/20190711005310/en/Top-5-Vendors-Global-Polyurethane-Foam-Market>.
13. **ISOPA.** Industry data. *Socio-Economic Information on the European Polyurethanes Industry*. [En línea] octubre de 2003. [Citado el: 12 de febrero de 2020.] Disponible en: http://www.polyurethanes.org/uploads/documents/Soc-Econ_Final_6-10-2003.pdf.
14. **COVESTRO SPAIN.** *Materials for megatrends*. [En línea] [Citado el: 12 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.covestro.es/en/company/about-covestro>.

15. **ICIS.** *Propylene Oxide (PO) Uses and Market Data*. [En línea] 2010 de abril de 2010. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/06/9076450/propylene-oxide-po-uses-and-market-data/>.
16. **RESEARCH AND MARKETS.** *Propylene Oxide Market - Growth, Trends, and Forecast (2019 - 2024)*. [En línea] 28 de Junio de 2019. [Citado el: 10 de Febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.globenewswire.com/news-release/2019/06/28/1875944/0/en/Propylene-Oxide-Worldwide-Markets-Expected-to-Witness-a-CAGR-of-5-9-During-2019-2024-Construction-Infrastructure-Segment-to-Dominate-Market-Demand.html>.
17. **MARKETS AND MARKETS.** *Propylene Oxide Market*. [En línea] Agosto de 2017. [Citado el: 10 de Febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/propylene-oxide-market-55659975.html>.
18. **BASF SE.** *New BASF and Dow HPPO Plant in Antwerp Completes Start-Up Phase*. [En línea] 5 de marzo de 2009. [Citado el: 18 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.basf.com/ru/ru/media/news-releases/2009/03/p-09-154.html>.
19. **FINCH, Heidi.** *ICIS. Chemical Profile: Europe propylene oxide*. [En línea] 03 de noviembre de 2017. [Citado el: 10 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2017/11/02/10160063/chemical-profile-europe-propylene-oxide/>.
20. **REPSOL.** *Propileno: nota técnica*. [En línea] enero de 2017. [Citado el: 11 de febrero de 2019.] Disponible en: <https://quimicaonline.repsol.com/s/grado?id=a460X000001G5jWQAS&language=es>.
21. **ICIS.** *Propylene oxide Asia prices, markets & analysis*. [En línea] 2016. [Citado el: 12 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.icis.com/explore/commodities/chemicals/propylene-oxide/asia/#regional-outlook>.
22. **ICIS.** *US propylene market to remain volatile through 2008*. [En línea] 12 de julio de 2018. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2018/07/12/10240640/us-propylene-market-to-remain-volatile-through-2018/>.
23. **INDEXBOX.** *Global Hydrogen Peroxide Market – India (\$55M), Germany (\$54M), and the U.S. (\$48M) are the Most Promising Overseas Markets*. [En línea] 11 de mayo de 2020. [Citado el: 01 de junio de 2020.] Disponible en: <https://www.globaltrademag.com/global-hydrogen-peroxide-market-india-55m-germany-54m-and-the-u-s-48m-are-the-most-promising-overseas-markets/>.
24. **PLASTIC INSIGHT.** *Polyurethane Properties, Production, Price, Market, and Uses*. [En línea] 2019. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.plasticsinsight.com/resin-intelligence/resin-prices/polyurethane/>.
25. **INTRATEC.** *Hydrogen Peroxide Prices*. [En línea] 2007. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.intratec.us/chemical-markets/hydrogen-peroxide-price>.

26. **ICIS.** ICIS pricing. *Propylene oxide (Europe)*. [En línea] 10 de enero de 2014. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://s3-eu-west-1.amazonaws.com/cjp-rbi-icis-globalassets/chemicals-propylene-oxide.pdf>.
27. **STATISTA.** *Average annual OPEC crude oil price from 1960 to 2019*. [En línea] 2020. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.statista.com/statistics/262858/change-in-opec-crude-oil-prices-since-1960/>.
28. **ORGANIZACIÓN DE LAS NACIONES UNIDAS.** *UN comtrade*. [En línea] 2020. [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://comtrade.un.org/db/mr/rfCommoditiesList.aspx?px=H1&cc=291020>.
29. **EVONIK.** *Basic information compiled for you: Hydrogen peroxide*. [En línea] [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.active-oxygens.com/product/h2o2/en/about-hydrogen-peroxide/general-information/pages/default.aspx>.
30. **ERCROS S.A.** *Agua oxigenada*. [En línea] [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: http://www.ercros.es/index.php?option=com_content&view=article&id=138&Itemid=1124&language=es.
31. **CEFIC.** Specialty Chemicals. *Peroxygens*. [En línea] [Citado el: 11 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://specialty-chemicals.eu/peroxygens/>.
32. **INTRATEC.** *TECHNOLOGY ECONOMICS: Propylene from Methanol*. Estados Unidos: CreateSpace Independent Publishing Platform, 2013. ISBN: 978-1483949819.
33. **PETROCHEMICALS EUROPE.** *EUROPEAN MARKET OVERVIEW*. [En línea] 2019. [Citado el: 12 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.petrochemistry.eu/about-petrochemistry/petrochemicals-facts-and-figures/european-market-overview/>.
34. **ASOCIACIÓN ESPAÑOLA DE OPERADORES DE PRODUCTOS PETROLÍFEROS.** *AOP. Memoria 2018*. [En línea] 2018. [Citado el: 12 de febrero de 2020.] Disponible en: https://www.aop.es/wp-content/uploads/2019/05/aop_memoria_2018.pdf.
35. **SCHMIDT, Franz et al.** *HPPO Process Technology: A nouvel route to propylene oxide without coproducts*. [En línea] marzo de 2014. [Citado el: 21 de febrero de 2020.]
36. **NIJHUIS, T. Alexander et al.** The Production of Propene Oxide: Catalytic Processes and Recent Developments. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2006, 45, págs. 3447-3459.
37. **ICIS.** *Propylene Oxide (PO) Production and Manufacturing Process*. [En línea] 12 de noviembre de 2011. [Citado el: 18 de febrero de 2020.] <https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/06/9076451/propylene-oxide-po-production-and-manufacturing-process/>.
38. **MCKETTA, John J.** *Encyclopedia of Chemical Processing and Design*. Nueva York: Marcel Dekker, Inc., 1993. págs. 88-127. Vol. 45. ISBN: 0-8247-2495-X.
39. **HOFEN, Willi et al.** *Process for the Epoxidation of Propene*. WO 2017/089079 A1 1 de junio de 2017.

40. **NEXANT. CHEM SYSTEMS.** *PERP Program. Hydrogen Peroxide-Based Propylene Oxide: New Report Alert.* [En línea] febrero de 2008. [Citado el: 19 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.nexantsubscriptions.com/file/40657/download?token=spjWF1J5>
41. **THYSSENKRUPP INDUSTRIAL SOLUTIONS AG.** *Propylene Oxide: The Evonik-uhde HPPO technology: Innovative, Profitable, Clean.* [En línea] [Citado el: 18 de febrero de 2020.] Disponible en: https://d13qmi8c46i38w.cloudfront.net/media/UCPthyssenkruppBAIS/assets.files/products___services/chemical_plants___processes/organic_chemicals___petrochemicals/2018-06-06_propylene-oxide-broschuere_zf.pdf.
42. **BLANCO-BRIEVA, Gema, et al.** *Catalysis Today. Selective decomposition of hydrogen peroxide in the epoxidation effluent of the HPPO process.* [En línea] 15 de octubre de 2011. [Citado el: 24 de febrero de 2020.] <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0920586111007036>.
43. **SCHMIDT, Franz et al.** *HPPO Process Technology: A nouvel route to propylene oxide without coproducts.* [En línea] marzo de 2014. [Citado el: 21 de febrero de 2020.]
44. **RUSSO, V. et al.** I&EC research. *Chemical and Technical Aspects of Propene Oxide Production via Hydrogen Peroxide (HPPO Process).* [En línea] 2013. [Citado el: 2 de marzo de 2020.] <https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/ie3023862>.
45. **INSTITUTO NACIONAL DE ESTADÍSTICA.** *Cifras oficiales de población resultantes de la revisión del Padrón municipal a 1 de enero.* [En línea] 2019. [Citado el: 24 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.ine.es/jaxiT3/Datos.htm?t=2907>.
46. **MAPA DE ESPAÑA.** *Mapa de Aragón Provincia de la Región.* [En línea] [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <http://mapa-de-espana.blogspot.com/2013/07/mapa-de-aragon-provincia-de-la-region.html>.
47. **ZARAGOZA TURISMO.** *Cómo llegar.* [En línea] [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <http://www.zaragoza.es/ciudad/turismo/es/organiza-viaje/como-llegar/como-llegar.htm>.
48. **TERMINAL MARÍTIMA DE ZARAGOZA.** *Terminal Marítima de Zaragoza.* [En línea] [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://tmzaragoza.eu/tmz/>.
49. **MICHELIN.** *Mapas.* [En línea] [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.viamichelin.es/web/Mapas-Planos?address=>.
50. **INSTITUTO ARAGONÉS DE ESTADÍSTICA.** *Paro Registrado.* [En línea] 4 de febrero de 2020. [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.aragon.es/documents/20127/1681070/paroreg.pdf>.
51. **GOBIERNO DE ARAGÓN. INSTITUTO ARAGONÉS DE FOMENTO.** *Suelo Industrial en Aragón: Empresarium.* [En línea] 10 de enero de 2019. [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.iaf.es/admin/poligonos/ver.php?id=326>.

52. **DIRECCIÓN GENERAL DEL CATASTRO.** *Consulta y certificación de Bien Inmueble.* [En línea] [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www1.sedecatastro.gob.es/CYCBienInmueble/OVCConCiud.aspx?del=50&mun=900&UrbRus=U&RefC=1853915XM8015D0001IY&Apenom=&esBice=&RCBice1=&RCBice2=&DenoBice=&from=nuevoVisor&ZV=NO>.
53. **AEMET.** *Datos Históricos Meteorológicos.* [En línea] [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://datosclima.es/index.htm>.
54. **INSTITUTO GEOGRÁFICO NACIONAL.** *Mapas de sismicidad y peligrosidad.* [En línea] 2002. [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <http://www.ign.es/web/ign/portal/mapas-sismicidad>.
55. **EL DIARIO.** *La despoblación es el problema más importante que tiene Aragón.* [En línea] 10 de septiembre de 2017. [Citado el: 26 de febrero de 2020.] Disponible en: https://www.eldiario.es/aragon/sociedad/despoblacion-problema-importante-Aragon_0_684881644.html.
56. **GOBIERNO DE ARAGÓN.** *Programa de ayudas a la industria y la PYME en Aragón (PAIP).* [En línea] [Citado el: 26 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.aragon.es/-/programa-de-ayudas-a-la-industria-y-la-pyme-en-aragon-fomento-industrial-y-pyme-economia-industria-y-empleo-departamentos-y-organismos-publicos-gobierno-de-aragon>.
57. **MECALUX LOGISMARKET.** *¿Qué es el ADR en el transporte de mercancías peligrosas?* [En línea] [Citado el: 27 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.logismarket.es/blog/que-es-adr-transporte-mercancias-peligrosas/>.
58. **GOBIERNO DE ARAGÓN.** *Estudios Universitarios en Aragón.* [En línea] [Citado el: 26 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.aragon.es/-/-que-estudiar-y-donde->.
59. **UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA.** *Oferta de estudios oficiales universitarios.* [En línea] [Citado el: 26 de febrero de 2020.] Disponible en: https://estudios.unizar.es/estudio/ver?id=151&anyo_academico=2019.
60. **ZUMDAHL, Steven S.** *Encyclopædia Britannica. Water.* [En línea] Encyclopædia Britannica, inc., 27 de enero de 2020. [Citado el: 20 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://www.britannica.com/science/water>.
61. **BERMEJO PATIÑO, Manuel R. et al.** *Guía dos elementos químicos: Historia, propiedades e aplicaci3ns.* Santiago de Compostela: Centro Ramón Piñeiro para a Investigación en Humanidades, 2018. págs. 37-40. ISBN: 9788445352977.
62. **MONUMENT CHEMICAL.** *Technical product information. Propylene Glycol (PG).* [En línea] 15 de enero de 2018. [Citado el: 20 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://monumentchemical.com/uploads/files/TDS/PG%20-%20TDS.pdf>.

63. **U.S. NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE.** PubChem. *Propylene glycol*. [En línea] [Citado el: 20 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Propylene-glycol#section=Drug-Gene-Interactions>.
64. **SOLVENTIS.** *Methoxy Propanol (PM)*. [En línea] [Citado el: 20 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://www.solventis.net/products/propylene-glycol-ethers/methoxy-propanol-pm/>.
65. **CHEMICAL BOOK.** *methoxypropanol*. [En línea] [Citado el: 20 de marzo de 2020.] Disponible en: https://www.chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_CB1928222.htm.
66. **SEIDER, Warren D. et al.** *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation*. Tercera. Danvers: John Wiley & Sons, 2009. ISBN: 978-0470-04895-5.
67. **SVRCEK, W. y MAHONEY, D.** *A real-time approach to process control*. 2ª edición. Inglaterra: John Wiley & Sons, Ltd, 2006. ISBN: 978-0-470-02533-8.
68. **OLLERO DE CASTRO, P. y FERNÁNDEZ CAMACHO, E.** *Instrumentación y control de plantas químicas*. 1ª edición. Madrid: Síntesis, 2012. ISBN: 9788497563345.
69. **SINNOTT, R. K.** *Chemical Engineering Design*. 4ª edición. Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. Vol. 6. ISBN: 0 7506 6538 6.
70. **TURMO SIERRA, Emilio.** *NTP 379: Productos inflamables: variación de los parámetros de peligrosidad*. [En línea] 1990. [Citado el: 1 de junio de 2020.] Disponible en: https://www.insst.es/documents/94886/326827/ntp_379.pdf/a8bbcd8a-a6c1-4dca-b452-f32213e25752.
71. **VILCHE SÁNCHEZ, Juan A. et al.** *Tabla de correspondencias entre las sustancias peligrosas nominadas Seveso III, el etiquetado CLP y las categorías de peligro Seveso II*. [En línea] Marzo de 2016. [Citado el: 1 de junio de 2020.] Disponible en: https://www.industriaquimica.es/descargar_documento/web_seveso.pdf
72. **STORCH DE GRACIA, J.M.ª, T. GARCÍA MARTÍN.** *Seguridad industrial en plantas químicas y energéticas*. Segunda: Diaz de Santos. ISBN: 978-84-7978-864-3.
73. **GENERALIC, Eni.** *Diamante de peligro de NFPA 704*. [En línea] 3 de marzo de 2020. [Citado el: 2 de junio de 2020.] Disponible en: https://www.periodni.com/es/diamante_de_nfpa_704.html.
74. **GLOBAL ASSET PROTECTION SERVICES LLC.** *Oil and Chemical Plant Layout and Spacing*. Hartford, Connecticut: Global Asset Protection Services LLC, 2015.
75. **AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS.** *DOW's Fire & Explosion Index Hazard Classification Guide*. 7ª edición. Nueva York: AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS, 1994. ISBN: 0-8169-0623-8.

ANEXO I

Balances de materia y energía

ÍNDICE

1.	BALANCES DE MATERIA	2
1.1.	Introducción	2
1.2.	Balances de materia por equipos	2
1.2.1.	Reactor R-101	2
1.2.2.	Flash V-201	3
1.2.3.	Flash V-202	4
1.2.4.	Columna de destilación preseparadora T-301	4
1.2.5.	Columna de destilación de C ₃ T-302	4
1.2.6.	Columna de destilación purificadora de PO T-303	5
1.2.7.	Columna de destilación Metanol-Agua T-304	5
1.2.8.	Recirculaciones.....	6
1.3.	Balance global.....	6
2.	BALANCES DE ENERGÍA	7
2.1.	Introducción	7
2.1.1.	Intercambiador de calor E-101	8
2.1.2.	Reactor R-101	8
2.1.3.	Válvula VLV-101 y Flash V-201	9
2.1.4.	Compresor C-201	9
2.1.5.	Condensador E-201 y Flash V-202	10
2.1.6.	Columna de destilación preseparadora T-301	11
2.1.7.	Columna de destilación de C ₃ T-302	12
2.1.8.	Compresor C-301	13
2.1.9.	Columna de destilación purificadora de PO T-303	13
2.1.10.	Intercambiador de calor E-307	14
2.1.11.	Intercambiador de calor E-308	15
2.1.12.	Columna de destilación Metanol-Agua T-304	15
3.	BIBLIOGRAFÍA.....	15

1. BALANCES DE MATERIA

1.1. Introducción

Los balances de materia son la base para el diseño de procesos: el balance de materia realizado sobre el proceso completo determinará las cantidades de materia prima requeridas y de producto producido. Asimismo, la realización de balances sobre unidades individuales del proceso marca los flujos y composiciones de las distintas corrientes y proporciona la información necesaria para el dimensionamiento de los equipos. La ecuación de conservación de la masa para cualquier sistema del proceso puede describirse empleando la Ecuación 1.

$$Salida = Entrada + Generación - Acumulación \quad \text{Ecuación 1}$$

Para los procesos en estado estacionario el término de acumulación es nulo. Además, en los equipos donde se llevan a cabo reacciones químicas (para el proceso en cuestión solo es el caso del reactor R-101) serán formados y consumidos distintos productos químicos. No obstante, en aquellas unidades donde no tengan lugar reacciones químicas, el balance de materia en estado estacionario se reduce a la Ecuación 2.

$$Salida = Entrada \quad \text{Ecuación 2}$$

Las ecuaciones de estos balances pueden ser referidas a cada especie química diferenciada presente en el proceso y escribirse en términos másicos o bien en función del número de moles.

1.2. Balances de materia por equipos

A continuación, será realizado el correspondiente balance en todos aquellos equipos donde se produzca una variación de los flujos y composiciones de salida. Por este motivo, no serán consideradas las bombas, compresores, intercambiadores y válvulas del proceso.

1.2.1. Reactor R-101

Definida la producción de óxido de propileno (150 kton/año), y los días de operación de la planta (330 días) es posible determinar los requerimientos de materias primas a la entrada del proceso. Así, en primer lugar, se calcula el flujo másico de PO que debe obtenerse en la corriente 23, por donde circula el PO con la pureza exigida (99,97% en peso).

$$1,5 \cdot 10^8 \frac{\text{kg de producto}}{\text{año}} \cdot \frac{1 \text{ año}}{330 \text{ días}} \cdot \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ h}} \cdot \frac{0,9997 \text{ kg PO}}{1 \text{ kg de producto}} = 18,9 \cdot 10^3 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

El flujo de PO obtenido a la salida del reactor debe ser superior a este valor calculado, pues los equipos empleados para realizar la separación del óxido de propileno de los demás compuestos químicos que lo acompañan en la corriente de salida del reactor no alcanzan eficacias del 100% y, por consiguiente, parte de este será perdido.

Para una primera estimación se calculan los requerimientos de propileno y peróxido de hidrógeno empleando la estequiometría de la reacción principal, que permiten obtener el flujo molar de PO calculado anteriormente. Empleando la forma diferencial del balance de moles para un reactor de lecho empacado, tal y como se describe en el *Anexo II. Cálculos Justificativos* del reactor R-101, conocida la cinética de reacción, se hallan los caudales de salida del reactor R-101 en función de la masa de catalizador empleada.

El peróxido de hidrógeno introducido al proceso marca las cantidades necesarias de entrada al reactor de disolvente (se emplea metanol) y propileno, pues ambos se especifican en función de este. Considerando las eficacias de cada equipo de separación, se realizan sucesivas iteraciones hasta lograr obtener la cantidad de PO especificada en la corriente de producto a la salida de proceso. Los valores obtenidos se muestran en la Tabla 1, en donde se verifica el cumplimiento de la Ley de Conservación de la Materia: la masa de los compuestos reaccionantes es igual a la masa de los productos de la reacción.

Tabla 1. Balance de materia en el reactor catalítico R-101

Flujo másico, kg/h	Corriente 6	Corriente 7
Metanol	80104,25	80104,25
Agua	8088,78	14086,34
Propileno	112487,31	98717,45
Oxígeno	26,24	136,90
Propilenglicol	0,00	93,95
Óxido de propileno	574,81	19508,52
Peróxido de hidrógeno	11366,02	0,00
TOTAL	212647,41	212647,41

1.2.2. Flash V-201

Este equipo tiene como objetivo principal la separación de los componentes más volátiles a la salida del reactor, específicamente propileno y oxígeno, luego de ser sometidos a un descenso de presión en la válvula VLV-101. Tomando en cuenta la volatilidad de cada una de las especies presentes en la mezcla, se determinó que el oxígeno será separado en su totalidad en la corriente de vapor, mientras que se asume posible evaporar un 53,08% del propileno que ingresa. A continuación, en la Tabla 2 se presentan los resultados del balance de materia en el equipo.

Tabla 2. Balance de materia en el separador flash V-201

Flujo másico, kg/h	Corriente 8	Corriente 9	Corriente 16
Metanol	80104,25	480,63	79623,62
Agua	14086,34	23,54	14062,81
Propileno	98717,45	52395,27	46322,18
Oxígeno	136,90	136,90	0,00
Propilenglicol	93,95	0,00	93,95
Óxido de Propileno	19508,52	573,61	18934,91
Peróxido de Hidrógeno	0,00	0,00	0,00
TOTAL	212647,41	53609,95	159037,47

1.2.3. Flash V-202

El evaporador flash llevará a cabo la separación de los gases (*off-gas*) que deben ser retirados del proceso, fundamentalmente del oxígeno. La corriente líquida consiste en el propileno a recircular y otros componentes propios del proceso. De acuerdo con los puntos de ebullición de los compuestos se asume una eficiencia del 93,97% de recuperación del propileno que ingresa al recipiente, mientras que la de separación de oxígeno es del 80,83%. Los valores de los flujos de las corrientes correspondientes a este equipo se muestran en la Tabla 3.

Tabla 3. Balance de materia en el separador flash V-202

Flujo másico, kg/h	Corriente 12	Corriente 13	Corriente 14
Metanol	480,63	1,76	478,86
Agua	24,12	3,68	20,45
Propeno	98717,06	5954,01	92763,05
Oxígeno	136,90	110,66	26,24
Propilenglicol	0,00	0,00	0,00
Óxido de Propileno	574,81	0,00	574,81
Peróxido de Hidrógeno	0,00	0,00	0,00
TOTAL	99933,52	6070,11	93863,41

1.2.4. Columna de destilación preseparatora T-301

La primera columna de destilación del proceso es empleada para separar por colas casi la totalidad del agua presente en el proceso, así como la mayor parte del metanol. En específico, se asumen eficacias de separación de 98,33 y 71,83%, respectivamente. Asimismo, al ser el compuesto más pesado del sistema, se obtendrá todo el propilenglicol por la corriente inferior de la columna. Los flujos resultantes son presentados en la Tabla 4.

Tabla 4. Balance de materia en la columna T-301

Flujo másico, kg/h	Corriente 16	Corriente 17	Corriente 25
Metanol	79623,62	22429,19	57194,43
Agua	14062,81	235,36	13827,44
Propeno	46322,18	46322,18	0,00
Oxígeno	0,00	0,00	0,00
Propilenglicol	93,95	0,00	93,95
Óxido de Propileno	18934,91	18934,91	0,00
Peróxido de Hidrógeno	0,00	0,00	0,00
TOTAL	159037,47	87921,64	71115,82

1.2.5. Columna de destilación de C₃ T-302

El objetivo de esta columna es la obtención por cabezas del propileno restante que no pudo ser separado en el tanque flash V-201. Posee una eficacia de separación del propeno de aproximadamente 100%, arrastrando pequeñas trazas de otros componentes: óxido de propileno y agua. De esta forma se consigue obtener por la parte inferior del equipo una corriente más concentrada en PO. Los flujos másicos calculados se representan en la Tabla 5.

Tabla 5. Balance de materia en la columna T-302

Flujo másico, kg/h	Corriente 17	Corriente 18	Corriente 20
Metanol	22429,19	0,00	22429,19
Agua	235,36	0,59	234,77
Propeno	46322,18	46321,78	0,40
Oxígeno	0,00	0,00	0,00
Propilenglicol	0,00	0,00	0,00
Óxido de Propileno	18934,91	1,20	18933,71
Peróxido de Hidrógeno	0,00	0,00	0,00
TOTAL	87921,64	46323,57	41598,07

1.2.6. Columna de destilación purificadora de PO T-303

En esta columna de destilación se pretende refinar el óxido de propileno hasta la pureza necesaria de producto, específicamente 99,97% en peso. De esta manera, se asume que todo el óxido de propileno que ingresa a la columna es separado por la corriente de salida superior, junto con trazas de propileno restantes y una pequeña parte del metanol presente en el equipo. Por otro lado, en la corriente de colas son separados metanol y agua, que se dirigen a la última columna de proceso. En la Tabla 6 se recogen los respectivos caudales másicos de entrada y salida del equipo.

Tabla 6. Balance de materia en la columna T-303

Flujo másico, kg/h	Corriente 20	Corriente 21	Corriente 22
Metanol	22429,19	5,28	22423,91
Agua	234,77	0,00	234,77
Propeno	0,40	0,40	0,00
Oxígeno	0,00	0,00	0,00
Propilenglicol	0,00	0,00	0,00
Óxido de Propileno	18933,71	18933,71	0,00
Peróxido de Hidrógeno	0,00	0,00	0,00
TOTAL	41598,07	18939,39	22658,68

1.2.7. Columna de destilación Metanol-Agua T-304

Finalmente, mediante esta torre se consigue la separación del metanol y el agua residual del proceso. Como se especifica en el *Anexo II. Cálculos Justificativos* de la columna de destilación T-304, es necesaria una separación alta del metanol, pues este compuesto es recirculado para su uso como disolvente en el proceso reactivo, por lo que se asumió un porcentaje de recuperación de 99,94% del de entrada, mientras que de agua se separará el 96,79% por la corriente de colas. En la Tabla 7 se observan los flujos másicos correspondientes a la columna.

Tabla 7. Balance de materia en la columna T-304

Flujo másico, kg/h	Corriente 28	Corriente 29	Corriente 31
Metanol	79618,34	79566,72	51,62
Agua	14062,21	451,87	13610,34
Propeno	0,00	0,00	0,00
Oxígeno	0,00	0,00	0,00
Propilenglicol	93,95	0,00	93,95
Óxido de Propileno	0,00	0,00	0,00
Peróxido de Hidrógeno	0,00	0,00	0,00
TOTAL	93774,50	80018,59	13755,91

1.2.8. Recirculaciones

En el proceso de producción de óxido de propileno a partir de peróxido de hidrógeno se emplean dos recirculaciones para el reaprovechamiento de los compuestos de alimentación, buscando de esta manera la reducción de costes y una utilización sostenible de los recursos. Por un lado, es recirculado el propileno (corriente 15), empleado como reactivo en exceso, al inicio del proceso. Al mismo tiempo, de la última columna de destilación (la T-304) se extrae por cabezas una corriente rica en metanol (corriente 30) que se reconduce al inicio del proceso para su uso como disolvente. Los valores del balance de materia realizado a la entrada del proceso, donde se juntan las corrientes de alimentación procedentes del almacén (corrientes 1, 2 y 3) junto con las recirculaciones citadas para obtener el flujo de entrada al reactor (corriente 4), se muestran en la Tabla 8. Asimismo, se verifica cómo el sumatorio de los flujos de las corrientes 1, 2, 3, 15 y 30 es igual al flujo de la corriente 4.

Tabla 8. Balance de materia en las recirculaciones

Flujo másico, kg/h	Corriente					
	1	2	3	4	15	30
Metanol	0,00	0,00	58,67	80104,24	478,86	79566,71
Agua	0,00	7577,34	39,11	8088,78	20,45	451,88
Propeno	19724,27	0,00	0,00	112487,32	92763,05	0,00
Oxígeno	0,00	0,00	0,00	26,24	26,24	0,00
Propilenglicol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Óxido de Propileno	0,00	0,00	0,00	574,81	574,81	0,00
Peróxido de Hidrógeno	0,00	11366,02	0,00	11366,02	0,00	0,00
TOTAL	19724,27	18943,36	97,78	212647,41	93863,41	80018,59

1.3. Balance global

Por último, tras la realización del balance de materia individual para los equipos de la Planta de producción de óxido de propileno, debe verificarse el cumplimiento de la Ley de conservación de la masa para el volumen de control formado por la totalidad del sistema. Para ello, se consideran los flujos de todas las corrientes de entrada al proceso, cuyo sumatorio debe ser igual al flujo total

de las corrientes de salida. Las corrientes de entrada son la alimentación fresca del propeno, el peróxido de hidrógeno y el metanol (corrientes 1, 2 y 3, respectivamente) mientras que las corrientes de salida se corresponden con el *off-gas* separado, el óxido de propileno obtenido como producto con la pureza requerida y el agua residual (corrientes 13, 21 y 31, respectivamente). En la Tabla 9 se muestran los caudales másicos de cada corriente y es posible verificar cómo coincide el total de masa entrante al sistema con el total de salida. Por consiguiente, se concluye que el balance global se satisface.

Tabla 9. Balance global de materia

Flujo másico, kg/h	ENTRADAS			SALIDAS		
	1	2	3	13	21	31
Metanol	0,00	0,00	58,67	1,76	5,28	51,62
Agua	0,00	7577,34	39,11	3,68	0,00	13610,34
Propeno	19724,27	0,00	0,00	5954,01	0,40	0,00
Oxígeno	0,00	0,00	0,00	110,66	0,00	0,00
Propilenglicol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	93,95
Óxido de Propileno	0,00	0,00	0,00	0,00	18933,71	0,00
Peróxido de Hidrógeno	0,00	11366,02	0,00	0,00	0,000	0,00
TOTAL	19724,27	18943,36	97,78	6070,11	18939,39	13755,91
SUMA TOTAL		38765,41			38765,41	

2. BALANCES DE ENERGÍA

2.1. Introducción

En el diseño de procesos, los balances de energía se realizan con el objetivo de determinar los requerimientos energéticos del mismo. La Primera Ley de la Termodinámica sentencia que la energía ni se crea ni se destruye, cuando esta desaparece en una forma, aparece simultáneamente en otras formas (1). Siguiendo este principio la Ecuación 3 describe una expresión general para la conservación de la energía.

$$\text{Energía de salida} = \text{Energía de entrada} + \text{Generación} - \text{Acumulación} \quad \text{Ecuación 3}$$

Es posible realizar balances de energía en cualquier etapa del proceso. Para esto, en el caso de los caudales de entrada y salida, se suele utilizar la energía interna (a través de la entalpía por mol) debido a que es una función de estado, es decir, que no depende de la trayectoria sino del estado inicial y el final. Las reacciones químicas, a su vez, tienen efectos caloríficos asociados, ya sea que se produzca una transferencia de calor, cambios de temperatura durante el transcurso de la reacción o ambos (1). Cuando se presente una reacción química, se considerará el término de generación en el balance. Por otro lado, al tratarse de un proceso en estado estacionario, el dato de acumulación tendrá un valor de cero.

Con respecto al cálculo de la entalpía específica de cada corriente, este se llevará a cabo a partir de su valor de calor específico (C_p) en las condiciones a las que se encuentre cada una. Es

importante establecer que el cálculo se realiza respecto a una temperatura de referencia T_R , la cual será considerada como 0 °C. La entalpía específica (kJ/kmol), en caso de tratar con un líquido, se determina de acuerdo con la Ecuación 4, donde C_{pl} es el calor específico del líquido (kJ/kmol °C), T la temperatura a la que se encuentra en °C. Los distintos calores específicos son recopilados de la base de datos del simulador de procesos *Aspen HYSYS*.

$$h = C_{pl} (T - T_R) \quad \text{Ecuación 4}$$

Si, por otro lado, se trata con un vapor saturado, su entalpía específica H se calcula sumándole el calor de vaporización, λ , a la entalpía líquida. Además, si se trata de un vapor sobrecalentado habrá que calcular la energía adicional correspondiente al calor sensible de la fase vapor. Esto es expuesto en la Ecuación 5, donde C_{pv} es el calor específico del vapor (kJ/kmol °C).

$$H = C_{pv} (T_v - T_{rocío}) + \lambda + C_{pl} (T_{burbuja} - T_l) \quad \text{Ecuación 5}$$

2.1.1. Intercambiador de calor E-101

En el intercambiador de calor E-101 se prepara la corriente 5 para su entrada al reactor, calentándola hasta la temperatura idónea a la que se lleva a cabo la reacción, 55 °C. El calor que es necesario aportar se determina a partir del balance de energía según la Ecuación 6.

$$Q = m_{5/6} C_{pl,5/6} (T_6 - T_5) \quad \text{Ecuación 6}$$

Donde $m_{5/6}$ es el flujo molar (kmol/h) de la corriente 5, el cual coincide con el de la corriente 6 que abandona el equipo, $C_{pl,5/6}$ el calor específico medio (kJ/kmol °C) y T_5 y T_6 las temperaturas de cada corriente. En la Tabla 10 se presentan los parámetros relevantes para el cálculo y el valor resultante para el calor a aportar.

Tabla 10. Balance de energía en el intercambiador de calor E-101

Parámetro	Valor
$m_{5/6}$, kmol/h	5967,08
$C_{pl,5/6}$, kJ/kmol °C	124,9
T_5 , °C	26,65
T_6 , °C	55
Q , kW	5869,14

2.1.2. Reactor R-101

El balance de energía en el reactor catalítico R-101 se expone de forma detallada en el *Anexo II: Cálculos justificativos*, concretamente en el apartado 1.9. *Balance de energía*, pues se trata de uno de los equipos objeto del diseño detallado. Se concluyó que se trata de un sistema exotérmico, pues se libera una importante cantidad de calor, el cual será transferido a una utilidad de agua refrigerada para mantener el lecho catalítico a una temperatura constante, pues el reactor opera en régimen isotérmico con el fin de obtener la conversión deseada de reactivos. En la Tabla 11 se muestra el calor total liberado, así como las temperaturas de la mezcla reaccionante y la utilidad.

Tabla 11. Balance de energía en reactor R-101

Parámetro	Valor
$Q_{generado}, kW$	-20667
Entrada mezcla reaccionante: $T_6, ^\circ C$	55
Salida mezcla reaccionante: $T_7, ^\circ C$	55
Entrada utilidad, $^\circ C$	7
Salida utilidad, $^\circ C$	32

2.1.3. Válvula VLV-101 y Flash V-201

Estos equipos son utilizados para disminuir la presión a la corriente 7 a la salida del reactor para conseguir una evaporación parcial de la mezcla, y así separar en fase vapor el propileno no reaccionado. De esta manera, en la válvula se consigue una presión de 6 bar. El balance de energía en este sistema se puede establecer asumiendo que es adiabático, es decir, que no intercambia energía con el exterior. Expresando este balance en la Ecuación 7, es posible conocer la temperatura de ambas corrientes de salida del separador flash, que, al encontrarse en equilibrio termodinámico, será la misma. Los resultados son presentados en la Tabla 12.

$$m_7 C_{pl,7} T_7 = m_9 (C_{pl,9} T_9 + \lambda_9) + m_{16} C_{pl,16} T_{16} \quad \text{Ecuación 7}$$

Tabla 12. Balance de energía en válvula VLV-101 y flash V-201

Parámetro	Valor
$m_7, kmol/h$	5969,30
$m_9, kmol/h$	1275,61
$m_{16}, kmol/h$	4693,69
$C_{pl,7}, kJ/kmol ^\circ C$	128,7
$C_{pl,9}, kJ/kmol ^\circ C$	103,4
$C_{pl,16}, kJ/kmol ^\circ C$	125,7
$\lambda_9, kJ/kmol$	18090
$T_7, ^\circ C$	55,00
$T_{9/16}, ^\circ C$	26,57

2.1.4. Compresor C-201

Los compresores son equipos empleados para aumentar la presión de un gas. En el caso del compresor C-201, se realiza un incremento de la presión de la corriente 10 de 4,6 bar. De esta forma, se busca alcanzar las condiciones óptimas en la corriente de salida de este equipo (corriente 11) que permitan una condensación parcial en el condensador E-201 para su posterior separación en el separador flash V-202 y recirculación del propeno a la sección 100.

El proceso de compresión conlleva incrementos en la temperatura que deben ser calculados. La suposición de gases ideales conduce a ecuaciones de relativa simplicidad y, asumiendo una compresión isentrópica, puede emplearse la Ecuación 8 para conocer la temperatura de la corriente de salida del equipo (1).

$$T_{11} = T_{10} \cdot \left(\frac{P_{11}}{P_{10}} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad \text{Ecuación 8}$$

Siendo T_{10} y T_{11} las temperaturas de las corrientes de entrada y salida del compresor, P_{10} y P_{11} las presiones de succión y descarga y γ la relación de capacidades caloríficas, calculada como el cociente de las capacidades caloríficas de la corriente de entrada a presión y a volumen constante, C_p y C_v , respectivamente. En la Tabla 13 se muestran los valores empleados para el cálculo y los resultados obtenidos.

Tabla 13. Balance de energía en el compresor C-201

Parámetro	Valor
$C_p, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	66,23
$C_v, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	54,2
γ	1,22
P_{10}, bar	6
P_{11}, bar	9,2
$T_{10}, ^\circ\text{C}$	17,64
$T_{11}, ^\circ\text{C}$	41,12

2.1.5. Condensador E-201 y Flash V-202

El sistema formado por el condensador E-201 y el flash V-202 funciona de manera similar al descrito en el apartado 2.1.3. *Válvula VLV-101* y *Flash V-201*, con la diferencia de que, en vez de descomprimir una corriente líquida para evaporarla parcialmente, se condensa parte de una corriente de vapor. En ambos casos se consigue una corriente bifásica que será separada en un tanque flash situado aguas abajo.

Para el presente caso, la corriente 11 obtenida de la descarga del compresor C-201 entra al condensador E-201 en estado gaseoso. Es necesario conocer la cantidad de calor que debe ser retirado para alcanzar el flujo de líquido deseado en la corriente salida (corriente 12) y que será recirculado tras su separación en el flash V-202. Para ello, debe calcularse la entalpía específica de cada una de las corrientes que entran y salen del sistema considerado, tomando en cuenta que la corriente de alimentación es un vapor sobrecalentado y las corrientes de salida son líquido y vapor saturado.

$$H_{11} = C_{pv,11} (T_{11} - T_{rocio,11}) + \lambda_{11} + C_{pl,11} (T_{burbuja,11}) \quad \text{Ecuación 9}$$

$$H_{13} = \lambda_{13} + C_{pl,13} T_{13} \quad \text{Ecuación 10}$$

$$h_{14} = C_{pl,14} T_{14} \quad \text{Ecuación 11}$$

De este modo, es posible realizar el balance de energía para calcular el término $Q_{condensador}$, el cual representa el calor que será cedido al agua de enfriamiento que se emplea como utilidad en el condensador. Para el cálculo de dicha energía se emplea la Ecuación 12.

$$Q_{condensador} = m_{13}H_{13} + m_{14}h_{14} - m_{11}H_{11} \quad \text{Ecuación 12}$$

Los resultados obtenidos se encuentran recogidos en la Tabla 14.

Tabla 14. Balance de energía en el intercambiador de calor E-101

Parámetro	Valor
$m_{11}, \text{kmol/h}$	2376,48
$m_{13}, \text{kmol/h}$	145,21
$m_{14}, \text{kmol/h}$	2231,27
$C_{pl,11}, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	112,1
$C_{pv,11}, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	72,11
$\lambda_{11}, \text{kJ/kmol}$	15860
$T_{11}, ^\circ\text{C}$	41,12
$T_{rocio,11}, ^\circ\text{C}$	23,24
$T_{burbuja,11}, ^\circ\text{C}$	14,6
$\lambda_{13}, \text{kJ/kmol}$	17910
$C_{pl,13}, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	98
$T_{13}, ^\circ\text{C}$	15,76
$C_{pl,14}, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	112,8
$T_{14}, ^\circ\text{C}$	15,76
$Q_{condensador}, \text{kW}$	-10515

2.1.6. Columna de destilación preseparatora T-301

En el caso de las columnas de destilación con condensador parcial, se hace necesario aportar un flujo de energía en la caldera con el fin de evaporar una parte del producto que sale de colas. Del mismo modo, en el condensador se requiere la retirada de calor del vapor que sale por la parte superior de la columna para condensar la porción que será reincorporada al equipo como reflujo. El balance de energía se aplica en primer lugar al condensador E-301 para determinar el calor que debe ser retirado, Q_C , y es representado por la Ecuación 12, mientras que el balance total de la columna es empleado para conocer el calor aportado en la caldera E-302, Q_b y se muestra en la Ecuación 14.

$$Q_C = m_{17} H_{17} + L_0 h_0 - V H \quad \text{Ecuación 13}$$

$$Q_b = m_{17} H_{17} + m_{25} h_{25} - m_{16} h_{16} - Q_C \quad \text{Ecuación 14}$$

Donde L_0 y V son los caudales de reflujo y de vapor de cabezas, respectivamente. Para determinarlos, se ha de establecer una relación de reflujo en la columna, R , que se define como el cociente entre L_0 y el flujo de destilado ($D = m_{17}$) y considerar el balance de materia en el equipo: $V = L_0 + D$. Al no tratarse de una de las unidades diseñadas de forma rigurosa, no se conocen datos suficientes de las corrientes asociadas a esta. Por lo tanto, la información necesaria para los cálculos del balance de energía fue recopilada del simulador *Aspen HYSYS*. La relación de reflujo es estimada a partir de una simulación aproximada hecha en el programa. Asimismo, se calcularon las entalpías por mol de cada corriente, y en la Tabla 15 son expuestos los resultados conseguidos.

Tabla 15. Balance de energía en la columna de destilación T-301

Parámetro	Valor
$m_{16}, \text{ kmol/h}$	4693,69
$m_{17}, \text{ kmol/h}$	2139,91
$m_{25}, \text{ kmol/h}$	2553,78
$C_{pl,16}, \text{ kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	125,7
$C_{pl,17}, \text{ kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	117,5
$\lambda_{17}, \text{ kJ/kmol}$	30640
$C_{pl,25}, \text{ kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	149,1
$T_{16}, ^\circ\text{C}$	26,57
$T_{17}, ^\circ\text{C}$	85,15
$T_{25}, ^\circ\text{C}$	117,9
$h_{16}, \text{ kJ/kmol}$	3339,35
$H_{17}, \text{ kJ/kmol}$	40645,13
$h_{25}, \text{ kJ/kmol}$	17578,89
R asumida	0,23
L_0	481,48
V	2621,39
$Q_c, \text{ kW}$	-4097,93
$Q_h, \text{ kW}$	36374,49

2.1.7. Columna de destilación de C₃ T-302

El cálculo de los flujos de calor en esta columna de destilación se desarrolla de la misma forma que en la T-301, con la excepción de que, en este caso, el caudal de alimentación es un vapor saturado, por lo que, como se indicó en la introducción, la determinación de la entalpía específica de esta corriente diferirá de la anterior. Los valores obtenidos son presentados en la Tabla 16.

Tabla 16. Balance de energía en la columna de destilación T-302

Parámetro	Valor
$m_{17}, \text{ kmol/h}$	2139,91
$m_{18}, \text{ kmol/h}$	1100,87
$m_{20}, \text{ kmol/h}$	1039,04
$C_{pl,17}, \text{ kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	117,5
$\lambda_{17}, \text{ kJ/kmol}$	30640
$C_{pl,18}, \text{ kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	100,8
$\lambda_{18}, \text{ kJ/kmol}$	16760
$C_{pl,20}, \text{ kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	155,10
$T_{17}, ^\circ\text{C}$	85,15
$T_{18}, ^\circ\text{C}$	-9,64
$T_{20}, ^\circ\text{C}$	97,23
$h_{17}, \text{ kJ/kmol}$	32148,70
$H_{18}, \text{ kJ/kmol}$	15788,29
$h_{20}, \text{ kJ/kmol}$	15080,37
R asumida	2,3
$L_0, \text{ kmol/h}$	2476,96
$V, \text{ kmol/h}$	3577,83
$Q_c, \text{ kW}$	-11531,61
$Q_h, \text{ kW}$	1602,34

2.1.8. Compresor C-301

El balance energético de este equipo se realiza siguiendo el mismo procedimiento descrito anteriormente para el compresor C-201. En este caso, el objetivo de la compresión de la corriente 18 es conseguir la misma presión al juntarse con la corriente gaseosa obtenida a la salida del separador flash V-201. El valor de la temperatura de la corriente de descarga se obtiene empleando la Ecuación 16 y los parámetros para el cálculo, así como los resultados se muestran en la Tabla 17.

$$T_{19} = T_{18} \cdot \left(\frac{P_{19}}{P_{18}} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad \text{Ecuación 15}$$

Tabla 17. Balance de energía en el compresor C-301

Parámetro	Valor
$C_p, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	61,37
$C_v, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	49,9
γ	1,23
P_{18}, bar	4,3
P_{19}, bar	6
$T_{18}, ^\circ\text{C}$	-9,64
$T_{19}, ^\circ\text{C}$	7,13

2.1.9. Columna de destilación purificadora de PO T-303

A diferencia de las dos columnas de destilación anteriores, la purificadora de PO presenta un condensador total. Por consiguiente, el vapor de esta columna que sale por cabezas (V) es transformado en su totalidad a una corriente de líquido saturado. Una parte será obtenida como destilado (D) y otra porción se devolverá a la columna (L_0).

El balance de energía realizado al condensador E-305 se define en la Ecuación 16. Es conocido el flujo obtenido en el destilado, pues se corresponde con el caudal de la corriente 21, sin embargo, se desconoce el caudal molar del vapor que sale por la parte superior de la columna. Por consiguiente, debe buscarse la manera de relacionar el vapor con el destilado. Es aquí donde entra en juego la relación de reflujo (L_0/D).

$$Q_C = V (-\lambda_{21}) \quad \text{Ecuación 16}$$

Se decide emplear una relación de reflujo de 4,19, pues es el valor obtenido al realizar una simulación aproximada en *Aspen HYSYS*. Así, conocido este valor y haciendo uso del balance de materia $V = L_0 + D$, es posible transformar la anterior expresión en la Ecuación 17 y de esta forma conocer el calor que debe retirar el condensador.

$$Q_c = m_{21} (R + 1) (-\lambda_{21}) \quad \text{Ecuación 17}$$

A partir de este punto se realiza el balance a la totalidad de la columna de manera análoga a lo descrito para la columna preseparatora T-301 haciendo uso de la Ecuación 14. De este modo, se determina la energía que debe ser aportada en la caldera. Los resultados del balance en esta columna se resumen en la Tabla 18.

Tabla 18. Balance de energía en la columna de destilación purificadora de PO T-303

Parámetro	Valor
$m_{20}, \text{kmol/h}$	1039,04
$m_{21}, \text{kmol/h}$	326,17
$m_{22}, \text{kmol/h}$	712,87
$C_{pl,20}, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	155,1
$C_{pl,21}, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	130,6
$\lambda_{21}, \text{kJ/kmol}$	25260
$C_{pl,22}, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	169,9
$T_{20}, ^\circ\text{C}$	97,23
$T_{21}, ^\circ\text{C}$	73,19
$T_{22}, ^\circ\text{C}$	101,7
$h_{20}, \text{kJ/kmol}$	15080,37
$H_{21}, \text{kJ/kmol}$	9558,61
$h_{22}, \text{kJ/kmol}$	17278,83
R asumida	4,19
$L_0, \text{kmol/h}$	1366,67
$V, \text{kmol/h}$	1694,84
Q_c, kW	-11878,12
Q_p, kW	11813,17

2.1.10. Intercambiador de calor E-307

La función de este intercambiador de calor es la de enfriar la corriente de colas de la columna purificadora de PO para prepararla para su entrada a la T-304. El caudal de energía a retirar se puede conocer a través de la Ecuación 18.

$$Q = m_{22/23} C_{pl,22/23} (T_{23} - T_{22}) \quad \text{Ecuación 18}$$

En la que $m_{22/23}$ representa el caudal molar total (kmol/h) de la corriente 22 y de la 23, $C_{pl,22/23}$ el calor específico medio (kJ/kmol °C) y T_{22} y T_{23} las temperaturas de cada corriente. En la Tabla 19 se recogen los parámetros relevantes para el cálculo y el flujo de calor que ha de ser retirado.

Tabla 19. Balance de energía en el intercambiador de calor E-307

Parámetro	Valor
$m_{22/23}, \text{kmol/h}$	712,87
$C_{pl,22/23}, \text{kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	167,65
$T_{22}, ^\circ\text{C}$	101,7
$T_{23}, ^\circ\text{C}$	68,34
Q, kW	-1107,48

2.1.11. Intercambiador de calor E-308

En este intercambiador se sigue el mismo principio que en el E-307. Es utilizado para enfriar la salida de la columna T-301 antes de ingresarla en la T-304. Es posible determinar el flujo de calor que se ha de retirar mediante el balance de energía, representado por la Ecuación 19.

$$Q = m_{25/26} C_{pl,25/26} (T_{26} - T_{25}) \quad \text{Ecuación 19}$$

Donde $m_{25/26}$ es el caudal molar total (kmol/h) de la corriente a enfriar, $C_{pl,25/26}$ el calor específico medio (kJ/kmol °C) y T_{25} y T_{26} las temperaturas de cada corriente. En la Tabla 20 se pueden observar los resultados obtenidos.

Tabla 20. Balance de energía en el intercambiador de calor E-308

Parámetro	Valor
$m_{25/26}, \text{ kmol/h}$	2553,78
$C_{pl,25/26}, \text{ kJ/kmol } ^\circ\text{C}$	146,15
$T_{25}, ^\circ\text{C}$	117,9
$T_{26}, ^\circ\text{C}$	68,34
$Q, \text{ kW}$	-5138,20

2.1.12. Columna de destilación Metanol-Agua T-304

La columna de destilación T-304 es uno de los equipos diseñados de forma rigurosa en este proyecto. Por esta razón, se conocen los datos necesarios para llevar a cabo el balance de energía externo en la columna, empleado para determinar el flujo de calor a aportar en la caldera y el que se ha de retirar en el condensador. Este procedimiento se desarrolla en profundidad en el *Anexo II: Cálculos Justificativos*, arrojando los resultados presentados en la Tabla 21.

Tabla 21. Balance de energía de la columna de destilación T-304

Parámetro	Valor
$Q_c, \text{ kW}$	-48450,23
$Q_h, \text{ kW}$	48714,44

3. BIBLIOGRAFÍA

1. SMITH, J.M., H. C. VAN NESS y M. M. ABBOTT. *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. México, D.F.: McGraw-Hill, Inc., 1996. ISBN: 970-10-1333-6.

ANEXO II

Cálculos justificativos

PARTE I

Reactor R-101

ÍNDICE

1.	Introducción	2
2.	Selección y caracterización del catalizador	3
3.	Mecanismo de reacción	5
4.	Selección del tipo de reactor	8
5.	Condiciones de operación y sistema reactivo.....	9
6.	Cinética de reacción	11
7.	Balance de materia y masa de catalizador necesaria	13
8.	Código programado en Matlab.....	17
8.1.	Programación de la función.....	17
8.2.	Ejecución de la función	18
9.	Balance de energía	18
10.	Dimensionamiento del equipo.....	22
10.1.	Diseño de los tubos	22
10.2.	Diseño de la carcasa	28
11.	Selección del material	39
12.	Diseño mecánico del equipo	43
12.1.	Presión de diseño.....	44
12.2.	Temperatura de diseño	44
12.3.	Espesores de carcasa y tubos.....	44
12.4.	Selección y dimensionado de cabezales.....	47
12.5.	Análisis de cargas.....	50
12.6.	Análisis de tensiones	54
12.7.	Selección del soporte.....	54
12.8.	Tubuladuras, conexiones y compensación de aperturas.....	57
13.	Válvula de alivio PSV-103.....	58
13.1.	Introducción	58
13.2.	Dimensionamiento de la válvula	58
14.	Bibliografía	60

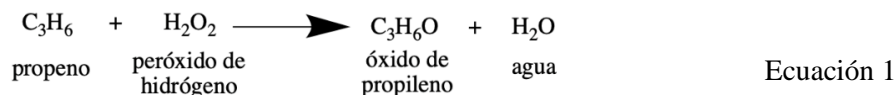
DISEÑO DETALLADO DEL REACTOR R-101

1. Introducción

El reactor es el corazón de un proceso químico, pues es el único equipo donde las materias primas son convertidas en productos. Por consiguiente, el diseño del reactor es de vital importancia para el diseño global del proceso y será realizado de manera rigurosa.

A la hora de realizar el diseño de un reactor químico deben satisfacerse los requerimientos asociados a factores químicos (cinéticas de reacción), así como factores relacionados con la transferencia de materia y calor y la seguridad. La necesidad de cumplir con estos factores interrelacionados y al mismo tiempo muchas veces contradictorios convierte en complejo el proceso de diseño del reactor. Sin embargo, para la mayoría de los casos, uno de estos factores será el predominante y marcará la elección del tipo de reactor y el método de diseño (1).

Sin lugar a duda, la reacción clave del proceso HPPO (*Hydrogen Peroxide to Propylene Oxide*) es la epoxidación de propeno empleando peróxido de hidrógeno para producir óxido de propileno (Ecuación 1). Esta reacción es irreversible y para que tenga lugar es imprescindible que los reactivos estén en contacto con el catalizador adecuado: silicalita de titanio (TS-1). Además, se decide emplear un disolvente orgánico (metanol) con el fin de mejorar la conversión e incrementar la selectividad respecto a la reacción de formación de óxido de propileno (PO).



No obstante, en el sistema también aparecen otras reacciones que llevan a la formación de productos no deseados. En la Figura 1 se muestra un esquema con todas las posibles reacciones que pueden suceder tras la formación del PO.

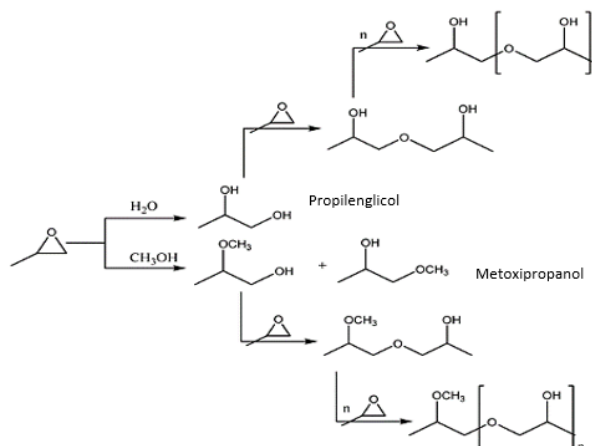


Figura 1. Posibles reacciones tras la epoxidación del propileno en el proceso HPPO. Fuente: (2)

Todas las reacciones presentes en la Figura 1 están relacionadas con la apertura del anillo del óxido de propileno. Este compuesto, en contacto con agua o metanol, forma propilenglicol (PG) y dos isómeros de metoxipropanol, respectivamente. Los dos compuestos formados son los principales subproductos del proceso y, dependiendo de la concentración de metanol empleada, es posible obtener proporciones distintas de cada uno de ellos. Además, el PO puede reaccionar tanto con el metoxipropanol como con el propilenglicol formados, dando lugar a diferentes productos de oligomerización. Debe ser señalado que esta formación de oligómeros es perjudicial para la actividad catalítica.

Asimismo, debe tenerse en cuenta la descomposición del peróxido de hidrógeno, dando lugar a oxígeno y agua. Esta reacción es de gran importancia por dos razones: el coste del peróxido de hidrógeno es uno de los factores principales a considerar en lo que respecta la economía del proceso y la descomposición de este compuesto da lugar a oxígeno molecular, que puede formar mezclas explosivas con el propeno.

Por consiguiente, se trata de un sistema con reacciones complejas, pues consta de reacciones múltiples que incluyen una combinación de reacciones en serie (las que conllevan la apertura del anillo del óxido de propileno) y en paralelo (la descomposición de peróxido de hidrógeno) (3).

Para reacciones que compiten (en serie y paralelo), debe ajustarse la temperatura, la presión y la masa de catalizador de tal forma que se obtengan los mayores rendimientos para el producto deseado, es decir, el óxido de propileno (4).

No existen unas condiciones de operación exactas para la epoxidación del propileno, sino que hay intervalos de temperatura y presión recomendados. Para la epoxidación de propeno en fase líquida, la bibliografía (5) establece una presión entre 15-50 bar y temperatura inferior a 60°C. Asimismo, se conoce que empleando las condiciones de operación óptimas y las concentraciones apropiadas de los distintos productos químicos en la corriente de entrada, se alcanzan conversiones de peróxido de hidrógeno y selectividades a PO superiores al 96%.

En las próximas líneas se seleccionará la configuración del reactor R-101, se establecerán las condiciones bajo las que operará dicho reactor y se justificarán las proporciones de reactivo y disolvente empleadas en la alimentación.

2. Selección y caracterización del catalizador

Un catalizador es una sustancia que afecta a la velocidad de una reacción, pero al final del proceso permanece sin cambio. El catalizador modifica únicamente la velocidad de la reacción, sin afectar al equilibrio termodinámico (3).

El logro clave que dio comienzo al desarrollo del proceso HPPO fue la síntesis del catalizador de silicalita de titanio-1 en 1980. Gracias a ello se hizo posible la oxidación directa de propeno a

óxido de propileno empleando peróxido de hidrógeno y sin la intervención de ningún agente oxidante. Sin embargo, el factor determinante que llevó a la instalación en el año 2008 de la primera planta industrial basada en la tecnología HPPO fue el desarrollo por parte de Evonik y ThyssenKrupp de un catalizador de silicalita de titanio de especial calidad.

Este catalizador presenta una actividad y selectividad únicas en varias reacciones de oxidación con sustratos orgánicos llevadas a cabo en presencia de peróxido de hidrógeno diluido y condiciones suaves de reacción, siendo agua el principal subproducto formado. La alta habilidad de coordinación de los sitios de titanio, asociada con la hidrofobicidad de la estructura de la silicalita, son responsables de esta remarcable e inusual actividad catalítica (6).

Por tanto, este proceso está estrechamente vinculado al empleo de un catalizador concreto. Así, para la reacción del proceso HPPO se emplea una zeolita de silicalita de titanio con una estructura cristalina tipo MFI y conocida como TS-1. En ella, los átomos de silicio (Si) son substituidos por átomos de titanio (Ti), formando los centros catalíticamente activos de TiO_4 .

Puesto que el catalizador se encuentra en fase sólida y la mezcla reaccionante es un líquido, se trata de un proceso catalítico heterogéneo. Para lechos fijos empacados, como es el caso, las heurísticas (7) recomiendan el uso de partículas de catalizador con un tamaño entre 2 y 5 mm. Se opta por el empleo de silicalita de titanio en forma de gránulos cilíndricos.

Para la caracterización de las partículas empleadas es necesario calcular el diámetro de partícula (D_p), esto es el diámetro de una esfera cuyo volumen es el mismo que el de la partícula que se desea caracterizar. Se emplea la Ecuación 2 para determinar el volumen de las partículas cilíndricas y con la Ecuación 3 se calcula el diámetro de dicha partícula.

$$V = \pi \cdot \frac{D^2}{4} \cdot L \quad \text{Ecuación 2}$$

$$D_p = \left(\frac{6 \cdot V}{\pi} \right)^{1/3} \quad \text{Ecuación 3}$$

Otro parámetro de interés es la esfericidad, en otras palabras, la relación existente entre la superficie externa de la esfera con el mismo volumen que la partícula y la superficie de la partícula. Es posible conocer su valor empleando la Ecuación 4.

$$\text{Esfericidad} = \frac{\text{Superficie esfera}}{\text{Superficie partícula}} = \frac{\pi \cdot D_p^2}{\pi \cdot D \cdot \left(L + \frac{D}{2} \right)} \quad \text{Ecuación 4}$$

Las dimensiones y caracterización de las partículas de catalizador se recogen en la Tabla 1.

Tabla 1. Caracterización y dimensiones del catalizador empleado. Fuente: (8)

Parámetro	Valor
Fase	Sólida
Forma	Gránulos cilíndricos
Porosidad	0,4
Densidad aparente, kg/m^3	650
Longitud, mm	5
Diámetro, mm	2
Volumen, mm^3	15,7
Diámetro de partícula, mm	3,11
Esfericidad	0,8

La desactivación del catalizador, acompañada con la pérdida de la actividad catalítica es un reto para los sistemas donde hay catálisis heterogénea. La principal razón que lleva a la desactivación del catalizador TS-1 es el bloqueo de los poros, ocasionado por la formación de productos de las reacciones secundarias.

El bloqueo de los sitios activos es reversible y existen diversos procedimientos que se pueden seguir para restaurar la actividad del catalizador, por ejemplo, mediante tratamiento térmico en presencia de una atmósfera oxidante empleando elevadas temperaturas. Otra opción para su regeneración es tratamiento con varios disolventes orgánicos (9). Se conoce que la vida catalítica del catalizador TS-1 es de varios meses, por consiguiente, se opta por llevar a cabo la regeneración del catalizador durante la parada anual que se programa para el mantenimiento.

3. Mecanismo de reacción

Es conocido que el mecanismo más probable del proceso de epoxidación se basa en la interacción entre las moléculas de peróxido de hidrógeno y los centros catalíticos del catalizador compuesto de titanio.

La primera fase del mecanismo de reacción consiste en la división reversible de un enlace Ti-OSi por efecto del peróxido de hidrógeno, formándose una especie Ti-OOH y la coadsorción de una molécula de algún alcohol (dependiendo del disolvente seleccionado, en este caso metanol). De esta forma, el hidropéroxido se estabiliza a través de un anillo de cinco miembros, como se visualiza en la Figura 2. Acto seguido tiene lugar la etapa donde sucede la epoxidación, aquí el oxígeno del peróxido adyacente al titanio (Ti) es transferido al enlace doble de la olefina, formándose un alcóxido de titanio. Finalmente, la desorción del epóxido y la reacción del Ti-OR con peróxido de hidrógeno para formar de nuevo especie activas, completan el ciclo catalítico (2).

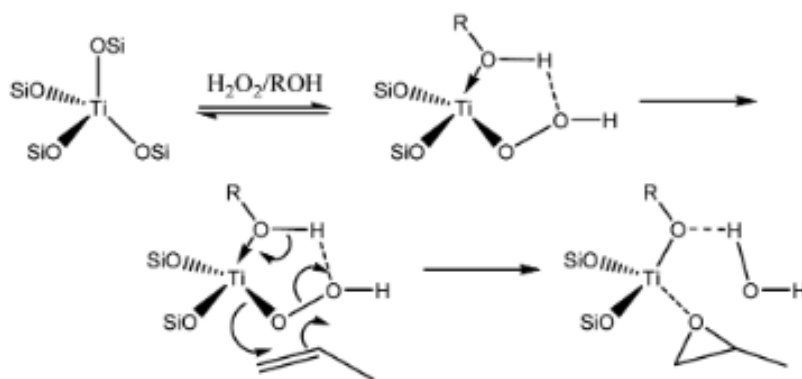


Figura 2. Mecanismo de la reacción principal. Fuente: (2)

Es posible descomponer el proceso en el que se efectúa una reacción catalítica heterogénea en una secuencia de pasos individuales y que se muestran en la Figura 3: difusión del reactivo desde el seno del fluido a la superficie externa del catalizador (paso 1), difusión del reactivo hacia la vecindad inmediata de la superficie catalítica interna (paso 2), adsorción del reactivo sobre la superficie del catalizador (paso 3), reacción sobre la superficie de catalizador (paso 4), desorción de los productos de la superficie (paso 5), difusión de los productos del interior de la partícula a la boca del poro (paso 6) y, por último, difusión de los productos desde la superficie externa de la partícula al seno del fluido (paso 7) (3).

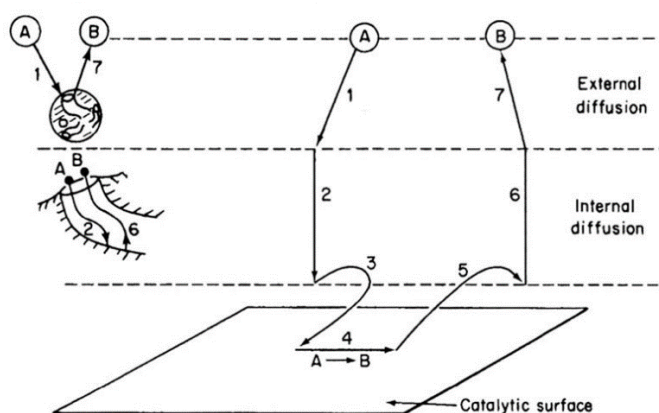


Figura 3. Pasos en una reacción catalítica heterogénea. Fuente: (3)

En las reacciones que tienen lugar sobre catalizadores sólidos, debe estudiarse la etapa que controla la reacción. En primer lugar, son descartadas las limitaciones por difusión, tanto externa como interna, es decir, los pasos 1, 2, 6 y 7. Por un lado, Sulimov et al (10) prueba que un aumento en el tamaño de la partícula de catalizador no conlleva ningún cambio en la conversión del peróxido de hidrógeno, como se observa en la Tabla 2. Queda así descartada la limitación por difusión interna.

Tabla 2. Conversión del peróxido de hidrógeno en relación con el tamaño de la partícula de catalizador.
Fuente: (10)

Granule size, mm	HP conversion, %			
	30°C	40°C	50°C	60°C
1.5–1.7	8.3	13.5	22.0	33.1
2.1–2.3	8.2	13.4	21.9	33.2

Por otro lado, para descartar la difusión externa como etapa limitante Sulimov et al (10) emplea diferentes pesos del catalizador (se varían las alturas del lecho empacado) y va modificando la velocidad espacial de alimentación, manteniendo la concentración inicial de la alimentación al reactor constante. De esta forma observa que la conversión del peróxido de hidrógeno no varía en función de la velocidad a la que se alimente la mezcla reaccionante al reactor y, como consecuencia, pueden despreciarse las limitaciones por difusión externa. Este hecho es posible observarlo en la Figura 4, donde se grafica la conversión del peróxido frente al tiempo de residencia convencional obtenida en la bibliografía, pudiéndose apreciar la misma conversión para cada tiempo en los dos *sets* de experimentos realizados con dos masas de catalizador diferentes.

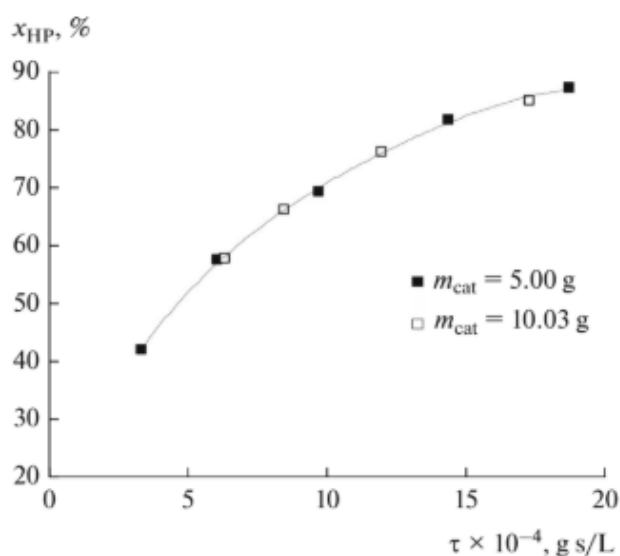


Figura 4. Efecto del tiempo de residencia convencional y el peso del catalizador en la conversión de peróxido de hidrógeno para la síntesis de PO. Fuente: (10)

Asimismo, los estudios que realiza muestran que el producto formado, óxido de propileno, puede inhibir la reacción de epoxidación. El PO y los productos formados de reacciones secundarias compiten en la adsorción de los sitios activos de Ti. Así, la reacción puede ser dividida en tres etapas: la adsorción del peróxido de hidrógeno, la reacción en la superficie y la desorción del PO. En los experimentos llevados a cabo en la bibliografía (10) se observó que la velocidad de la

epoxidación incrementa con el aumento de la concentración del peróxido de hidrógeno y del propileno. De este hecho se dedujo que la etapa limitante es la reacción superficial.

4. Selección del tipo de reactor

Hoy en día, existe una amplia variedad de configuraciones de reactores para el proceso HPPO. En la Figura 5 se presenta una lista de todos los tipos de reactores patentados y de sus condiciones de operación.

reactor	T (°C)	P (bar)
batch reactor	0–40	1–20
continuously stirred tank reactor (CSTR)	50–65	13
packed bed reactor (PBR)	40–50	15–20
trickle bed reactor (down-flow)	40	25
bubble siphon reactor	35–56	1
recycle reactor	55	>15
heat exchangers reactor	30–60	25

Figura 5. Condiciones de operación y tipos de reactores patentado para el proceso HPPO. Fuente: (2)

Para estudios a nivel laboratorio o para investigaciones sobre el catalizador, es usual el empleo de reactores tipo *batch*. No obstante, al escalar el proceso, los reactores de tipo *trickle bed*, lecho empacado (PBR) y reactores-intercambiadores son los más ampliamente utilizados.

A continuación, se comparan tres disposiciones típicas de reactores de lecho empacado y se justifica la selección realizada para la planta de producción de óxido de propileno.

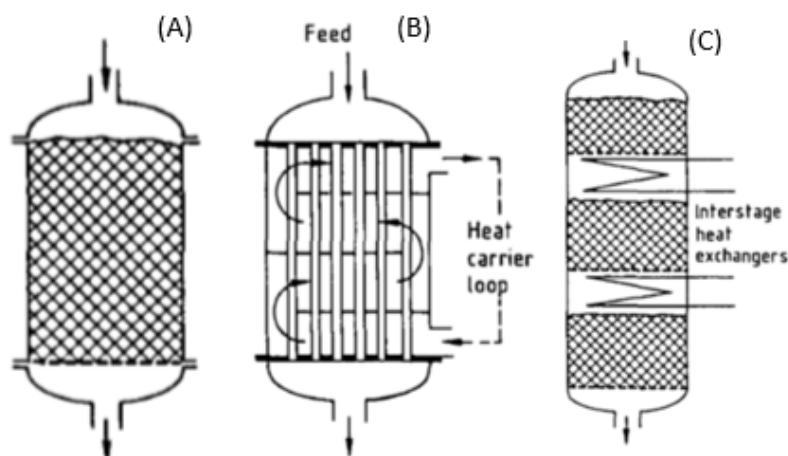


Figura 6. Reactores típicos para lecho empacado. Fuente: (11)

El desarrollo de los reactores con lecho empacado para uso industrial comenzó con el reactor adiabático (A) de la Figura 6. Este, debido al cambio adiabático de temperatura solo puede ser

operado hasta una conversión limitada. Una variante de este tipo de reactor es la disposición en serie de múltiples lechos empacados habiendo intercalado entre cada etapa un intercambiador de calor que proporcione o retire la energía de reacción necesaria o liberada. El esquema de este tipo de reactor se muestra en la Figura 6 (C). Por último, el reactor de lecho fijo multitubular (B) de la Figura 6 constituye uno de los tipos más antiguos y aún predominante de esta clase de reactores de lecho fijo. Esta disposición adopta la configuración de los conocidos intercambiadores de carcasa y tubos. En el interior de cada uno de los tubos se localiza el catalizador empacado. El medio donde se produce la transferencia de calor se hace circular entorno al haz de tubos. Mientras que para reacciones endotérmicas puede ser utilizado un gas como medio de transferencia de calor, para reacciones fuertemente exotérmicas se emplean exclusivamente líquidos o bien medios de transferencia de calor en ebullición. De esta forma se hace factible conseguir la temperatura de operación para el catalizador en el estrecho intervalo necesario para el control selectivo de la reacción (11).

La epoxidación de olefinas con peróxido de hidrógeno es, como la mayoría de las reacciones de oxidación, altamente exotérmica. Por consiguiente, deben ser tomadas precauciones y asegurar una eficiente retirada de calor del sistema para mantener la reacción bajo control. Este problema es especialmente pronunciado en sistemas de flujo continuo que empleen reactores de lecho empacado. Asimismo, la conversión y la selectividad a PO en las reacciones de epoxidación están afectadas en gran medida por la temperatura en el lecho y, por ello, su control es un factor clave en el proceso HPPO (5).

Por lo expuesto en el párrafo anterior, se descarta emplear reactores del tipo A y C, pues el control de la temperatura resulta más complejo. Así, se opta por el uso de un reactor tipo intercambiador multitubular pues, aunque la caída de presión en esta configuración sea mayor que en otras, proporciona un buen control térmico que permitirá operar a la temperatura a la que se obtenga la conversión y selectividad deseadas. De hecho, los reactores con esta configuración son comúnmente denominados “reactores isotérmicos”, pues suelen emplearse cuando se busca controlar la temperatura de la reacción para que esta suceda lo más isotérmica posible.

5. Condiciones de operación y sistema reactivo

Debido a la elevada energía de activación requerida para la reacción de epoxidación, el proceso debe llevarse a cabo a una determinada temperatura mínima que permita alcanzar una conversión razonable. Sin embargo, el calor generado por la exotermicidad de la reacción debe ser efectivamente retirado del reactor, pues a pesar de que un aumento de la temperatura del sistema incrementa la velocidad de la reacción principal, también provoca un aumento de las reacciones secundarias, disminuyendo la selectividad de la reacción de interés (5).

Por tanto, el objetivo debe ser mantener el reactor a una temperatura donde se obtenga un buen balance entre la conversión del peróxido de hidrógeno y la selectividad a PO. Por este motivo, se realiza el diseño de un reactor exotérmico donde toda la energía liberada será transferida a un medio refrigerante, con el objetivo de mantener el lecho del reactor a una temperatura constante. Siguiendo las recomendaciones de la bibliografía (5), se decide seleccionar una temperatura en el lecho de 55°C. Asimismo, para el tipo de reactor seleccionado, dependiendo de la fuente consultada, se recomiendan valores entre 25 y 30 bar. Se toma una presión comprendida entre ambos valores: 28 bar.

Respecto al uso de un disolvente, en el apartado 6.6. *Selección del disolvente* de la Memoria se selecciona el empleo del metanol. Se conoce que entre los diferentes tipos de disolventes que pueden ser utilizados para la epoxidación de propileno, este compuesto químico es el que proporciona mejores resultados: la actividad catalítica es mayor con elevadas concentraciones de metanol debido a que, como fue explicado en el mecanismo de reacción, para que la reacción de epoxidación tenga lugar es necesario la formación de un anillo intermediario de cinco miembros, en el que participa una molécula de metanol. El aumento de la relación $\text{CH}_3\text{OH}/\text{H}_2\text{O}_2$ favorece la formación de dicho anillo y, por tanto, se acelera la velocidad de la reacción principal. De esta forma, se aumenta la selectividad a PO. Al mismo tiempo, se disminuye la selectividad de reacciones secundarias al disminuir la concentración del agua por el incremento de la concentración de metanol. Sin embargo, desde el punto de vista de la aplicación industrial, elevadas relaciones molares $\text{CH}_3\text{OH}/\text{H}_2\text{O}_2$ conllevan un elevado consumo energético y torres de mayores dimensiones para la purificación del metanol (9).

En bibliografía (12) se recomienda una relación molar $\text{CH}_3\text{OH}/\text{H}_2\text{O}_2$ entre 5-15. De este modo, con el objetivo de evitar una columna de destilación metanol-agua de excesivas dimensiones, se opta por el empleo de un caudal de disolvente en el reactor de 2500 kmol/h, lo que se corresponde con una relación molar de 7,33.

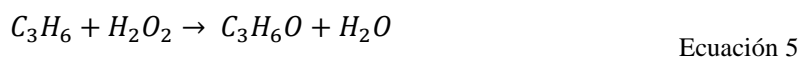
A nivel industrial es habitual, siempre y cuando sea posible, utilizar en exceso el reactivo con el coste menor y como reactivo limitante el compuesto químico más caro. De esta forma se asegura una alta conversión del reactivo de mayor coste y que no quede parte de él sin emplear, evitando así su desperdicio. Por esta razón, se opta por emplear propileno en exceso respecto al peróxido de hidrógeno, para así alcanzar un elevado consumo del peróxido. En bibliografía (5) se recomienda una relación molar $\text{H}_2\text{O}_2/\text{C}_3\text{H}_6$ en el rango 1,1-10. Se selecciona un valor de 8, pues con él se consigue una conversión óptima del peróxido. Puesto que esta relación es bastante elevada, quedará una importante cantidad de propileno sin reaccionar pero que será recirculado posteriormente al reactor R-101.

Cabe destacar que la descomposición del peróxido de hidrógeno en el interior del reactor sucede al mismo tiempo por dos vías distintas: debido a la temperatura del reactor, se producirá una pequeña descomposición de parte de este compuesto, pero, al mismo tiempo, las especies coordinadas no tetraédricas del titanio del catalizador catalizan la descomposición del peróxido. Por esta razón, será considerada la cinética de la reacción secundaria de descomposición de peróxido de hidrógeno por efecto del catalizador y se asume que las pequeñas trazas que queden se descomponen en su totalidad por efecto de la temperatura. De este modo, todo el peróxido de hidrógeno será consumido en el interior del reactor.

Por último, a la temperatura establecida con anterioridad a la que se decide operar el reactor (55°C) se opta por considerar despreciable la reacción secundaria que involucra la formación de metoxipropanol, pues de la bibliografía (12) se conoce que su selectividad es considerablemente inferior que las reacciones de epoxidación y formación de propilenglicol.

De esta forma, el sistema reactivo está compuesto por: el metanol que actúa como disolvente, el propileno alimentado en exceso, el peróxido de hidrógeno empleado como reactivo limitante, el óxido de propileno que es el producto de interés, el agua, el propilenglicol producido en la reacción en serie con la principal y el oxígeno formado por la descomposición del peróxido.

Las tres reacciones que se considera que tienen lugar en el interior del reactor R-101 se muestran a continuación. La Ecuación 5 muestra la reacción de epoxidación del propileno, es decir, la reacción principal y de interés. De la misma manera, la Ecuación 6 y Ecuación 7 representan las reacciones de formación de propilenglicol y la descomposición de peróxido de hidrógeno, respectivamente.



6. Cinética de reacción

En la bibliografía utilizada (10) fueron realizados diversos estudios experimentales que se emplearon posteriormente para la construcción de un modelo cinético. Para ello, fueron realizadas una serie de suposiciones que serán comentadas en las próximas líneas. En primer lugar, se asume que la superficie del catalizador es homogénea. También se opta por considerar que la adsorción de la olefina inicial y el agua sobre la superficie del catalizador puede ser despreciable y que la reacción de interés sucede entre el peróxido de hidrógeno adsorbido en la superficie del catalizador y la olefina en disolución. Por lo comentado en el apartado 3. *Mecanismo de reacción*

se establece la reacción de superficie como etapa limitante y se considera que las reacciones secundarias de formación de propilenglicol y de descomposición de peróxido de hidrógeno tienen lugar en la superficie catalítica. Debe ser señalado que, para reacciones heterogéneas fluido-sólido, la reacción sucede en la superficie del catalizador, por este motivo la velocidad de reacción es expresada en función de la masa del catalizador de sólido, W (3). Así, la velocidad de reacción se define como:

$$-r'_A = \text{kmol de A/s} \cdot \text{kg}_{\text{catalizador}}$$

La velocidad de las reacciones químicas que tienen lugar durante la epoxidación del propileno en presencia de un catalizador de silicalita de titanio en metanol es descrita por el siguiente sistema de tres ecuaciones (ecuaciones 8, 9 y 10) en forma de fracción racional (10).

$$r'_1 = \frac{k_1 \cdot b_{HP} \cdot C_{HP} \cdot C_{Pr}}{1 + b_{HP} \cdot C_{HP} + b_{PO} \cdot C_{PO}} \quad \text{Ecuación 8}$$

$$r'_2 = \frac{k_2 \cdot b_{PO} \cdot C_{PO} \cdot C_W}{1 + b_{HP} \cdot C_{HP} + b_{PO} \cdot C_{PO}} \quad \text{Ecuación 9}$$

$$r'_3 = \frac{k_3 \cdot b_{HP} \cdot C_{HP}}{1 + b_{HP} \cdot C_{HP} + b_{PO} \cdot C_{PO}} \quad \text{Ecuación 10}$$

Donde r'_1 es la velocidad de la reacción principal, r'_2 la velocidad de la reacción secundaria donde se forma el propilenglicol y r'_3 la velocidad de la descomposición catalítica del peróxido de hidrógeno. Los coeficientes de adsorción del peróxido de hidrógeno y el óxido de propileno se representan como b_{HP} y b_{PO} , respectivamente. C_{HP} representa la concentración de peróxido de hidrógeno en la mezcla, C_{Pr} la concentración del propileno, C_{PO} la concentración del óxido de propileno y C_W la concentración del agua. Por último, k_1 , k_2 y k_3 representan las constantes cinéticas de reacción.

Mediante las expresiones de las ecuaciones 11, 12 y 13, es posible establecer la relación de dependencia de las constantes cinéticas de reacción y los coeficientes de adsorción con la temperatura.

$$k_i = k_{0,i} \cdot e^{-\frac{E_i}{R \cdot T}} \quad \text{Ecuación 11}$$

$$b_{HP} = b_{0,HP} \cdot e^{\frac{Q_{HP}}{R \cdot T}} \quad \text{Ecuación 12}$$

$$b_{PO} = b_{0,HP} \cdot e^{\frac{Q_{PO}}{R \cdot T}} \quad \text{Ecuación 13}$$

Siendo, $k_{0,i}$, $b_{0,HP}$ y $b_{0,PO}$ los factores preexponenciales, E_i la energía de activación de las i reacciones y Q_{HP} y Q_{PO} el calor de adsorción del peróxido de hidrógeno y el óxido de propileno, respectivamente (13).

Para encontrar los valores de las anteriores ecuaciones la fuente bibliográfica consultada (10) llevó a cabo varias series de experimentos con diferentes concentraciones iniciales y en el rango de temperatura 30-60 °C y determinó que los valores de la Tabla 3 describen adecuadamente los datos experimentales obtenidos. Así, estos permiten predecir la composición de la reacción de mezcla en un amplio rango de variación de diferentes factores y con distintas conversiones del peróxido de hidrógeno.

Tabla 3. Parámetros cinéticos para la epoxidación de propileno. Fuente: (10)

Parámetro	Valor
$k_{0,1}, m^3/s \text{ kg}$	364
$k_{0,2}, m^3/s \text{ kg}$	131
$k_{0,3}, kmol/s \text{ kg}$	4,96
$b_{0,HP}, m^3/kmol$	$5 \cdot 10^{-4}$
$b_{0,PO}, m^3/kmol$	$1,83 \cdot 10^{-4}$
$E_1, kJ/kmol$	43030
$E_2, kJ/kmol$	60590
$E_3, kJ/kmol$	49810
$Q_{HP}, kJ/kmol$	18710
$Q_{PO}, kJ/kmol$	20480

Conocidos los valores anteriores, se determinan los parámetros cinéticos a la temperatura de operación del reactor (55°C) empleando las ecuaciones 11-13. Los valores empleados y los resultados de los cálculos se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4. Parámetros cinéticos para la epoxidación de propileno

Parámetro	Valor
$R, kJ/kmol \text{ K}$	8,314
T, K	328
$k_1, m^3/s \text{ kg}$	$5,145 \cdot 10^{-5}$
$k_2, m^3/s \text{ kg}$	$2,967 \cdot 10^{-8}$
$k_3, kmol/s \text{ kg}$	$5,841 \cdot 10^{-8}$
$b_{HP}, m^3/kmol$	0,476
$b_{PO}, m^3/kmol$	0,331

7. Balance de materia y masa de catalizador necesaria

Para dimensionar el reactor R-101 debe conocerse la cantidad de masa de catalizador necesaria para satisfacer los requerimientos de producción de óxido de propileno. Cada tubo del reactor

multitubular albergará en su interior una porción del lecho catalítico necesario. Así, en primer lugar, se calcula el peso total de catalizador necesario.

La deducción de la ecuación de diseño para un reactor catalítico de lecho empacado (comúnmente denominado *PBR*, por sus siglas en inglés) se efectúa análogamente a la ecuación de diseño para reactores de flujo en pistón, con la diferencia de que la coordenada de volumen se sustituye por la coordenada de masa del catalizador (Figura 7).

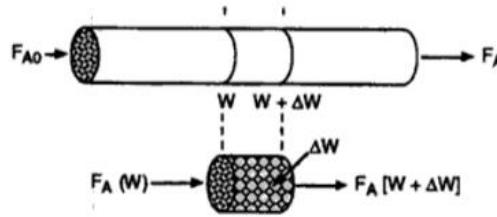


Figura 7. Diagrama de un reactor de lecho empacado. Fuente: (3)

Asumiendo que no existen gradientes radiales de concentración, temperatura o velocidad de reacción, el balance de moles generalizado para la especie A sobre la masa de catalizador se expresa en la Ecuación 14.

$$\begin{array}{ccccccc} \text{entrada} & - & \text{salida} & + & \text{generación} & = & \text{acumulación} \\ F_A(W) & - & F_A(W + \Delta W) & + & r'_A \Delta W & = & 0 \end{array} \quad \text{Ecuación 14}$$

Tras dividir la expresión anterior entre ΔW y tomando $\Delta W \rightarrow 0$ como límite, se obtiene la forma diferencial del balance molar para reactores de lecho empacado, recogida en la Ecuación 15.

$$\frac{dF_A}{dW} = -r'_A \quad \text{Ecuación 15}$$

Es posible conocer la variación de los flujos molares para el peróxido de hidrógeno, el propileno, el óxido de propileno, el agua, el propilenglicol y el oxígeno a lo largo del lecho catalítico del reactor R-101 con la siguiente serie de ecuaciones (ecuaciones 16-21), donde se tiene en cuenta el coeficiente estequiométrico de cada compuesto.

$$\frac{dF_{HP}}{dW} = -r'_1 \quad \text{Ecuación 16}$$

$$\frac{dF_{Pr}}{dW} = -r'_1 \quad \text{Ecuación 17}$$

$$\frac{dF_{PO}}{dW} = r'_1 - r'_2 \quad \text{Ecuación 18}$$

$$\frac{dF_W}{dW} = r'_1 - r'_2 + r'_3 \quad \text{Ecuación 19}$$

$$\frac{dF_{PG}}{dW} = r'_2 \quad \text{Ecuación 20}$$

$$\frac{dF_{O_2}}{dW} = 0,5 \cdot r'_3 \quad \text{Ecuación 21}$$

No se considera variación del flujo molar del disolvente empleado (el metanol) puesto que no interviene en ninguna reacción y, por lo tanto, su caudal molar permanece constante.

Establecida la variación del flujo de cada uno de los compuestos químicos del sistema reactivo respecto a la masa de catalizador, se resuelve el anterior sistema de ecuaciones diferenciales con ayuda del *software* matemático Matlab. Es necesario iterar con diferentes valores de masa de catalizador hasta obtener el valor óptimo que proporcione los flujos deseados a la salida del reactor R-101. Atendiendo a heurísticas, se debe enfocar la búsqueda de masa de catalizador hacia la mejor selectividad, es decir, con la que se obtenga mayor selectividad a PO.

Para reacciones en fase líquida se asume que el volumen (v_0) permanece constante y mediante la Ecuación 22 puede conocerse la relación entre el flujo molar y la concentración de cada componente de la mezcla.

$$F_i = C_i \cdot v_0 \quad \text{Ecuación 22}$$

En apartado 8. *Código programado en Matlab*, se muestra el código que se ejecuta para el cálculo de la concentración de cada componente según su cinética. Se encuentra que para una masa de 5230 kg es posible obtener una selectividad a PO superior al 99% y una conversión del peróxido de hidrógeno en la reacción principal en torno el 98% (Figura 8). Ambos valores concuerdan con lo establecido por la bibliografía, donde se estipula que empleando el catalizador TS-1, es posible obtener en el reactor del proceso de HPPO selectividades a PO y conversiones de peróxido superiores al 96% (5).

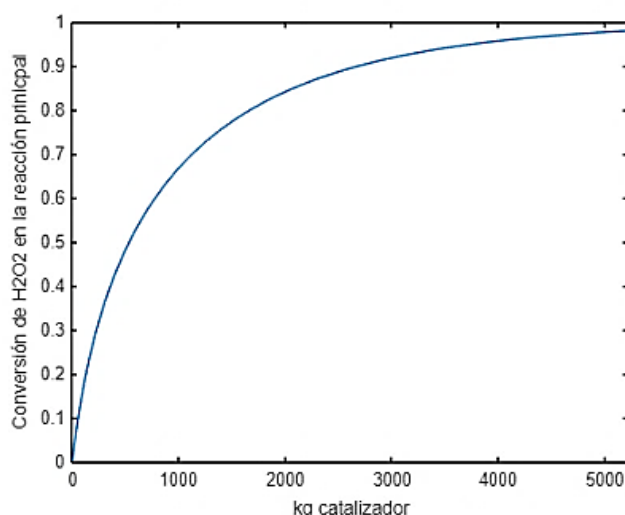


Figura 8. Variación de la conversión de peróxido de hidrógeno a lo largo del lecho empacado. Fuente: elaboración propia en Matlab

En la Figura 9-A se muestra la variación de los flujos molares respecto la masa de catalizador. Para poder visualizar de forma más detallada la formación de óxido de propileno se muestra ampliado el rango de interés en la Figura 9-B. Asimismo, es posible observar cómo los flujos de oxígeno y propilenglicol son muy bajos a lo largo de todo el lecho empacado.

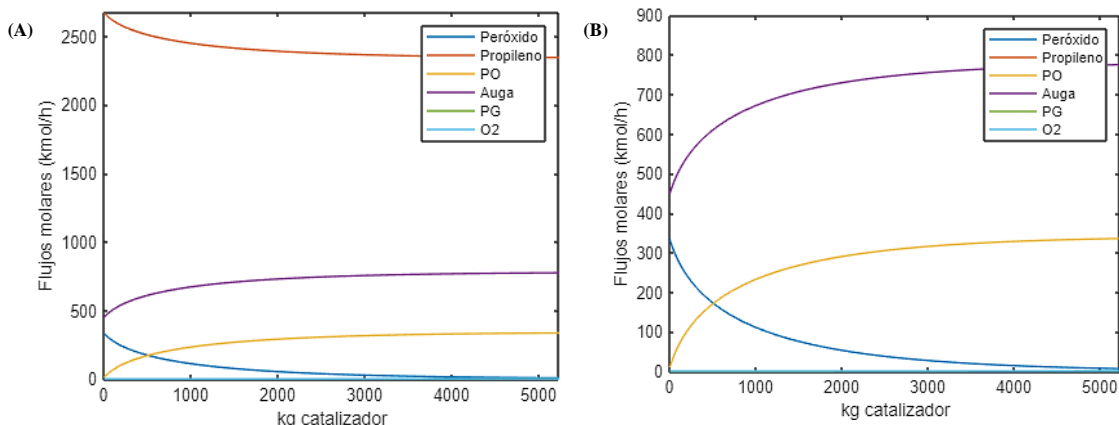


Figura 9. Variación de los flujos molares a lo largo del reactor R-101. Fuente: elaboración propia en Matlab

En la Tabla 5 se muestran los flujos de entrada al reactor y los valores obtenidos a la salida, asumiendo la descomposición total por efectos térmicos del peróxido de hidrógeno que no reacciona. Atendiendo al principio de conservación de la masa, y considerando que se trata de un proceso en estado estacionario (no hay acumulación), la masa de entrada debe ser igual a la de salida. Puesto que así se verifica, el balance de materia entorno la unidad del reactor R-101 cierra.

Tabla 5. Balance de materia en el reactor R-101

Componente	Entrada reactor R-101		Salida reactor R-101	
	Corriente 6		Corriente 7	
	Flujo molar (kmol/h)	Flujo másico (kg/h)	Flujo molar (kmol/h)	Flujo másico (kg/h)
Metanol	2500	80104,25	2500	80104,25
Agua	449	8088,78	781,91	14086,34
Propileno	2673,21	112487,32	2345,97	98717,45
Oxígeno	0,82	26,24	4,28	136,90
Propilenglicol	0	0	1,23	93,95
Óxido de propileno	9,90	574,81	335,9	19508,52
Peróxido de hidrógeno	334,15	11366,02	0	0
	Total masa entrada:	212647,41	Total masa salida:	212647,41

8. Código programado en Matlab

8.1. Programación de la función

```
%Función
function dfdw=epox(w,Fi);
%Se añade al vector de flujos molares de entrada al reactor el flujo de metanol:
%su valor es constante dado que se utiliza exclusivamente como disolvente y
%no participa en ninguna reacción
Fi(7)=2500; %kmol/h
%Se especifica el vector de pesos moleculares para cada compuesto químico en
%el orden: peróxido de hidrógeno, propileno, óxido de propileno, agua,
%propilenglicol, oxígeno y metanol.
Mm=[34.0146 42.0795 58.0789 18.0152 76.0941 31.9988 32.0417];
%Se especifica el vector de densidades de cada uno de los compuestos del sistema
%reactivo a la temperatura de operación del reactor (55°C) siguiendo el mismo
%orden que para los pesos moleculares.
densi=[1409.5 451.8 785.4 986.937451832088 1009.338 33.37 985.3]; %kg/m3
%Se crea el vector Fmi para el cálculo de los flujos másicos por componente y
%posteriormente se determina el flujo másico total representado como Fm.
Fmi=[];
Fmi=Fi.*Mm;
Fm=sum(Fmi); %kg/h
%Se obtienen las fracciones másicas de cada componente en el vector xmasico y
%se realiza el cálculo de la densidad de la mezcla entrante al reactor (D).
xmasico=[]; xmasico=Fmi./Fm;
dens=[];
dens=densi.*xmasico;
D=sum(dens); %kg/m3
%Se determina el flujo volumétrico a la entrada del reactor (v0).
v0=Fm/D %m3/h
%Se crea un vector de concentraciones (C) para cada uno de los compuestos
químicos que participan es las reacciones químicas.
c=[]; c=Fi/v0; %kmol/m3
C=[c(1) c(2) c(3) c(4) c(5) c(6)]; %kmol/m3
%Siendo:
%c(1) la concentración de peróxido de hidrógeno, c(2) la concentración de
propileno, c(3) la concentración del peróxido de hidrógeno, c(4) la
concentración de agua, c(5) la concentración de propilenglicol y c(6) la
concentración del oxígeno
%Valores de las constantes cinéticas a Tª=55°C.
k1=5.145*10^(-5)*3600; %m3/(h)(kg) Reacción principal.
k2=2.967*10^(-8)*3600; %m3/(h)(kg) Reacción de formación de PG.
k3=5.841*10^(-8)*3600; %kmol/(h)(kg) Reacción de descomposición del peróxido.
%Valores constantes de adsorción a Tª=55°C.
bhp=0.476; %m3/kmol
bpo=3.331; %m3/kmol
%Ecuaciones cinéticas.
r1=k1*bhp*C(1)*C(2)/(1+bhp*C(1)+bpo*C(3));
r2=k2*bpo*C(3)*C(4)/(1+bhp*C(1)+bpo*C(3));
r3=k3*bhp*C(1)/(1+bhp*C(1)+bpo*C(3));
%Sistema de ecuaciones diferenciales de los balances molares.
dfdw(1,:)=(-r1-r3); %balance para el peróxido de hidrógeno.
dfdw(2,:)=-r1; %balance para el propileno.
dfdw(3,)=(r1-r2); %balance para el PO.
dfdw(4,)=(r1-r2+r3); %balance para el agua.
dfdw(5,)=r2; %balance para el PG.
dfdw(6,)=0.5*r3; %balance para el oxígeno.
end
```

8.2. Ejecución de la función

```
%Se introduce el vector de flujos molares a la entrada del reactor, siendo:  
%fi(1) el flujo de peróxido de hidrógeno, fi(2) el flujo de propileno, fi(3)  
%el flujo de óxido de propileno, fi(4) el flujo de agua, fi(5) el flujo de  
%propilenglicol y fi(6) el flujo de oxígeno.  
fi=[334.15 2673.21 9.90 449 0 0.82] %kmol/h  
%Vector con la masa de catalizador del reactor.  
wspan=[0 5230];%kg  
%Se ejecuta la función anteriormente programada y se emplea el comando  
%ode45 para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales de los balances  
%de materia.  
[w,F]=ode45(@epox,wspan,fi);  
%Representación gráfica de la variación de los flujos molares en función de  
%la masa de catalizador.  
figure(1)  
plot(w,F)  
axis([0 5230 0 2680]);  
xlabel('kg catalizador'); ylabel('Flujos molares (kmol/h)');  
legend('Peróxido','Propileno','PO','Auga','PG','O2');  
%Cálculo de conversión de H2O2 en la reacción principal y representación  
%gráfica para ver su evolución a medida que se incrementa la masa de  
%catalizador  
xHP=(F(:,3)-fi(3)+F(:,5))/fi(1);  
figure(2);  
plot(w,xHP);  
axis([0 5230 0 1]);  
xlabel('kg catalizador'); ylabel('Conversión de H2O2 en la reacción  
principal');
```

9. Balance de energía

Una vez conocida la masa de catalizador necesaria para alcanzar los valores de conversión y selectividad optimizador por la bibliografía para el proceso HPPO, es posible realizar los cálculos energéticos correspondientes.

En la mayor parte de los procesos donde tienen lugar reacciones químicas es necesario añadir o retirar calor. La cantidad de calor involucrada en una reacción depende de las condiciones en que se esté operando y para su cálculo es necesario determinar la entalpía de la reacción. En las siguientes líneas se explicará el procedimiento para su determinación.

Partiendo de las entalpías estándar de formación de cada uno de los compuestos químicos envueltos en el sistema reactivo es posible determinar si se trata de una reacción exotérmica o endotérmica. De esta manera podrá conocerse si para mantener el sistema a una temperatura constante será necesaria la retirada o aporte de calor. En la Tabla 6 se recogen los valores de entalpías de formación a la temperatura de 298 K obtenidos del simulador de procesos químicos *Aspen Hysys*.

Tabla 6. Entalpías de formación

Compuesto	$H_f^\circ (kJ/mol)$
H ₂ O	-285,54
Propeno	4,74
O ₂	0
PG	-481,44
PO	-120,68
H ₂ O ₂	-188

Conociendo los datos de entalpías de formación y empleando la Ecuación 23 se puede conocer el valor de las entalpías de reacción estándar, en otras palabras, el calor liberado cuando la reacción se lleva a cabo en condiciones estándar: componente puro, a 1 atm de presión y 25°C.

$$\Delta H_{rj}^\circ = \sum \nu_i \cdot H_{f,P}^\circ - \sum \nu_i \cdot H_{f,R}^\circ \quad \text{Ecuación 23}$$

Siendo, ν el coeficiente estequiométrico de cada uno de los i compuestos en la correspondiente j reacción; $H_{f,P}^\circ$ la entalpía de formación de los productos; $H_{f,R}^\circ$ la entalpía de formación de los reactivos y ΔH_{rj}° la entalpía estándar de reacción.

A continuación, dado que el reactor opera a 55°C y los datos de entalpía están a la temperatura estándar, es necesario conocer su valor a la temperatura de operación. Para aquellas reacciones que no incluyen cambio de fase y tienen lugar a presión constante es posible obtener la variación de entalpía en un intervalo de temperatura a partir de la Ecuación 24. Puesto que fue asumido que el proceso de reacción sucede a una presión constante de 28 bar, puede ser utilizada dicha expresión.

$$\Delta H_{Qi} = \int_{T_1}^{T_2} c_{p_i} \cdot dT \quad \text{Ecuación 24}$$

Debe tenerse en cuenta que el calor específico varía con la temperatura, por consiguiente, es necesario conocer las expresiones empíricas que representen esta variación. Mediante el polinomio de cuarto grado (Ecuación 25) es posible obtener los calores específicos correspondientes al agua y el propilenglicol en estado líquido en el intervalo de temperaturas de interés. Para ello se emplean las constantes proporcionadas en la bibliografía y recogidas en la Tabla 7.

$$c_{p_i} \left(\frac{J}{kmol \cdot K} \right) = C_1 + C_2 \cdot T + C_3 \cdot T^2 + C_4 \cdot T^3 + C_5 \cdot T^4 \quad \text{Ecuación 25}$$

Tabla 7. Constantes para el cálculo del calor específico. Fuente: (14)

	C1	C2	C3	C4	C5
Agua	276370	-2090,1	8,125	-0,01212	$9,37 \cdot 10^{-6}$
Propilenglicol	58100	445	0	0	0

Sin embargo, debido a que no se encontraron valores bibliográficos en las condiciones deseadas para las demás especies, se emplea el simulador *Aspen Hysys* para obtener los valores de los calores específicos del propileno, del oxígeno, del peróxido de hidrógeno y del óxido de propileno. Los valores obtenidos a las dos temperaturas de interés se muestran en la Tabla 8.

Tabla 8. Valores de calores específicos

	Cp a 25°C (J/kmol K)	Cp a 55°C (J/kmol K)
Agua	75387	75270
Propilenglicol	190750	204106
Óxido de propileno	114000	79490
Propileno	115300	147700
Peróxido de hidrógeno	85280	85450
Oxígeno	29220	29520

Una vez determinados los calores específicos, empleando la Ecuación 26 se determina la entalpía a la temperatura de reacción para las tres reacciones que tienen lugar en el interior del reactor R-101.

$$\Delta H_{rj} = \Delta H_{rj}^{\circ} + \sum_i v_i \cdot \int_{298\text{ K}}^{328\text{ K}} C_{p_i} \cdot dT \quad \text{Ecuación 26}$$

Como se observa en la Tabla 9, los valores obtenidos son negativos dado que, siguiendo el criterio de signos empleado, el calor cuando es liberado por el sistema toma signo negativo y, por consiguiente, se trata de tres reacciones exotérmicas. Esto concuerda con la información encontrada en la bibliografía (9).

Tabla 9. Datos para calcular el calor generado total

Reacción	ΔH_{rj} (kJ/mol)	Masa reaccionante (kmol/h)	Calor generado (kJ/h)
R1 (Reacción principal)	-224,30	327,23	$-7,34 \cdot 10^7$
R2 (Reacción de formación de PG)	-74,46	1,23	$-9,19 \cdot 10^4$
R3 (Reacción de descomposición de HP)	-97,41	9,06	$-8,82 \cdot 10^5$

Conociendo la cantidad de masa reaccionante en cada una de las reacciones, se determina el calor total implicado. La reacción principal es fuertemente exotérmica y, como es de esperar, se libera una importante cantidad de calor. El calor generado por las tres reacciones, calculado empleando

la Ecuación 27, debe ser retirado del sistema para así poder mantener la condición de reactor isotérmico.

$$Q_{generado} = Q_{R1} + Q_{R2} + Q_{R3} = -7,44 \cdot 10^7 \text{ kJ/h} \quad \text{Ecuación 27}$$

Por consiguiente, como fue explicado en la introducción, se emplea un reactor-intercambiador donde la mezcla reaccionante circula por el interior de los tubos y, al mismo tiempo, estos se encuentran dentro de una carcasa donde se hace circular un fluido que retira el calor total liberado calculado anteriormente. Dado que al sistema de enfriamiento entrará el calor liberado por la reacción, se hace necesaria la Ecuación 28 para mantener el criterio de signos.

$$Q_{retirado} = - Q_{generado} \quad \text{Ecuación 28}$$

En la industria es habitual el empleo de agua como refrigerante. Se trata de un líquido con gran capacidad calorífica, su coste es bajo, no es tóxica y con su uso se evitan problemas medioambientales como la destrucción de la capa de ozono generados por otros refrigerantes. Dado que no se prevé que el fluido de enfriamiento experimente ningún cambio de fase, despejando la Ecuación 29 se conoce el flujo de agua necesario para conseguir el enfriamiento requerido.

$$Q_{retirado} = m_{agua} \cdot C_p \cdot (T_{so} - T_{si}) \quad \text{Ecuación 29}$$

Siendo C_p el calor específico que se calcula empleando la correlación de la Ecuación 25 con los respectivos coeficientes del agua y a la temperatura media entre el valor de entrada y salida de la carcasa, m_{agua} el flujo másico de agua requerido, T_{so} la temperatura de salida de carcasa y T_{si} la temperatura de entrada en carcasa. En primer lugar, se baraja el empleo de agua de enfriamiento procedente de torres de enfriamiento, pues es una utilidad económica y ampliamente utilizada en industria: su rango de temperatura se sitúa entre los 27-52 °C, según heurísticas (7).

Sin embargo, empleando dicho rango, el área de transferencia necesaria es muy elevado, haciéndose necesario utilizar un excesivo número de tubos e incrementando el coste del equipo. Por esta razón, se opta por el empleo de agua refrigerada (*chilled water*) como utilidad. Las temperaturas seleccionadas para la entrada y salida de la carcasa son las recomendadas en bibliografía (4). En la Tabla 10 se muestran los valores empleados para el cálculo del caudal de utilidad necesario.

Tabla 10. Valores para el cálculo del caudal de refrigerante necesario

Parámetro	Valor
$Q_{\text{retirado}}, kJ/h$	$7,44 \cdot 10^7$
Q_{retirado}, kW	20667
Peso molecular, $kg/kmol$	18,02
$T_{si}, ^\circ C$	7
$T_{so}, ^\circ C$	32
$T_{\text{media}}, ^\circ C$	19,5
$C_p, kJ/(kmol)(K)$	75,49
$m_{\text{agua}}, kg/s$	197,3
$V_{\text{agua}}, m^3/s$	0,2

10. Dimensionamiento del equipo

La estructura seleccionada para el reactor R-101 es de carcasa y tubos, configuración típica que suelen adoptar los intercambiadores. Por ello, para su dimensionamiento se sigue lo establecido por la Asociación de Fabricantes de Intercambiadores Tubulares, también conocida como TEMA, y fundada en 1939. Esta asociación ha desarrollado un conjunto de estándares relativos a la construcción de intercambiadores de calor. Estos estándares han sido aceptados a nivel global como referentes en el diseño de intercambiadores del tipo carcasa y tubos (15). De esta forma, será posible obtener las medidas necesarias de los tubos y, posteriormente, se conocerán las dimensiones de la carcasa del reactor en cuestión.

10.1. Diseño de los tubos

Cada tubo tendrá como función albergar en su interior una pequeña parte del lecho catalítico donde sucederán las reacciones químicas. Todos los tubos poseerán las mismas dimensiones. Deben realizarse los cálculos apropiados para encontrar las dimensiones de los tubos que permitan distribuir el peso del catalizador y aportar el área de intercambio necesaria. Es de interés incrementar entre un 10-20% el peso total de catalizador obtenido en el diseño para que las posibles pérdidas por envejecimiento se vean compensadas y asegurar el cumplimiento de las exigencias de producción de óxido de propileno requeridas (16). Así, se opta por un incremento del 15%. El valor sobredimensionado calculado se muestra en la Tabla 11.

Tabla 11. Sobredimensionamiento del peso del catalizador

Parámetro	Valor
$m_{\text{catalizador diseño}}, kg$	5230
Factor de sobredimensionado	1,15
$m_{\text{catalizador sobredimensionado}}, kg$	6015

Con el valor sobredimensionado de masa de catalizador y conocido el valor de la densidad aparente del lecho catalítico proporcionado en la ficha comercial del catalizador, es posible

determinar el volumen del lecho empacado del reactor. Para este cálculo se emplea la Ecuación 30.

$$V_{lecho} = \frac{m_{cat}}{\rho_{lecho}} \quad \text{Ecuación 30}$$

Siendo V_{lecho} el volumen del lecho catalítico, ρ_{lecho} su densidad aparente y m_{cat} la masa de catalizador previamente calculada. Una vez determinado el volumen del lecho, este debe ser distribuido en un número concreto de tubos siguiendo la Ecuación 31.

$$V_{lecho} = n_t \cdot L_t \cdot \frac{\pi \cdot D_{it}^2}{4} \quad \text{Ecuación 31}$$

Siendo V_{lecho} el volumen del lecho catalítico, n_t el número de tubos necesario, L_t la longitud de cada tubo y D_{it} su diámetro interno. En los estándares de diseño de TEMA se define como habitual los tubos con diámetros en el rango de 5/8 (6,6 mm) a 2 pulgadas (50 mm). Relativo a la longitud, las dimensiones preferidas están comprendidas entre los 6 (1,83 m) y los 24 (7,32 m) pies.

Como fue mencionado con anterioridad, por tratarse de un reactor del tipo multitubular, en cada uno de los tubos irá una parte igual del total de la masa de catalizador necesaria. Así, es necesario suponer y posteriormente estandarizar las dimensiones de los tubos para hallar cuantas unidades de estos son necesarias. Las dimensiones seleccionadas para los tubos tienen que considerar no solo la distribución del volumen del lecho catalítico, sino que también deben proporcionar el área de transferencia necesaria para mantener la reacción en condiciones isotérmicas. Esta área se determina mediante la Ecuación 32.

$$Q_{retirado} = U_{estimado} \cdot A_{requerida} \cdot \Delta T_m \quad \text{Ecuación 32}$$

Siendo $Q_{retirado}$ el calor cedido a la masa de agua que circula por carcasa, U el coeficiente global de transmisión de calor a través de los tubos y ΔT_m la diferencia media logarítmica de la temperatura calculada empleando la Ecuación 33.

$$\Delta T_m = \frac{(T_{ti} - T_{si}) - (T_{to} - T_{so})}{\ln \frac{(T_{ti} - T_{si})}{(T_{to} - T_{so})}} \quad \text{Ecuación 33}$$

Siendo T_{ti} y T_{to} las temperaturas de entrada y salida en los tubos respectivamente y T_{si} y T_{so} las correspondientes a la carcasa. En la Tabla 12 se proporcionan valores típicos del coeficiente global de transferencia de calor. Por el interior de los tubos la mezcla reaccionante contiene disolventes orgánicos (el metanol) y aceites ligeros. Se estima un valor para este coeficiente de 770 W/m²°C. Posteriormente deberá verificarse que este valor estimado se aproxime al calculado más adelante empleando la Ecuación 58 de la página 38.

Tabla 12. Valores típicos de coeficientes globales. Fuente: (1)

Intercambiadores de carcasa y tubos: enfriadores		
Fluido caliente	Fluido frío	U ($W/m^2\text{ }^{\circ}C$)
Disolventes orgánicos	Agua	250-750
Aceites ligeros	Agua	350-900
Aceites pesado	Agua	60-300
Gases	Agua	20-300

Deben ser realizadas diversas iteraciones variando la longitud y el diámetro de los tubos hasta conseguir que el área disponible para el intercambio de calor sea igual o superior a la requerida para mantener una temperatura constante en el lecho catalítico. El área disponible se conoce a partir de la geometría de los tubos haciendo uso de la Ecuación 34. En la Tabla 13, se muestran los resultados de los cálculos realizados para conocer la transferencia de calor necesario para el sistema. Se indican, además, las dimensiones estandarizadas seleccionadas para los tubos.

$$A_{disponible} = n_t \cdot L_t \cdot \pi \cdot D_{ot} \quad \text{Ecuación 34}$$

Tabla 13. Cálculo de las dimensiones de los tubos y el área de transferencia

Parámetro	Valor
$Q_{retirado}, kJ/h$	$7,44 \cdot 10^7$
$Q_{retirado}, kW$	20667
m_{cat}, kg	6015
$\rho_{lecho}, kg/m^3$	650
V_{lecho}, m^3	9,25
L_t, m	7,32
D_{ot}, mm	60
D_{it}, mm	53
n_t	573
$U_{estimado}, W/m^2\text{ }^{\circ}C$	770
$T_{si}, ^{\circ}C$	7
$T_{so}, ^{\circ}C$	32
$T_{ti}, ^{\circ}C$	55
$T_{to}, ^{\circ}C$	55
$\Delta T_m, ^{\circ}C$	34
$A_{requerida}, m^2$	789,41
$A_{disponible}, m^2$	790,62

Los tubos estándares de acero seleccionados poseen un diámetro nominal de 2 pulgadas, un *Schedule* 40 y presentan un espesor de 3,5 mm, satisfaciendo los requerimientos exigidos posteriormente en el diseño mecánico. A continuación, para la verificación de la adecuación de estos tubos al reactor que está siendo diseñado debe calcularse la caída de presión a lo largo de su longitud. Es conveniente recalcar que el interior de los tubos no se encuentra vacío, sino que está relleno del lecho poroso. Por tanto, para conocer la pérdida de carga debe usarse una expresión

apropiada para estos sistemas. Basándose en numerosos ensayos experimentales abarcando un amplio rango de formas y tamaños distintos de partículas, Ergun (1952) propuso la siguiente expresión general (Ecuación 35) para cualquiera condición de flujo a través de un lecho empacado. La ecuación de Ergun combina las componentes laminar y turbulenta del gradiente de presión. El primer sumando de la expresión domina cuando régimen de flujo es laminar mientras que el segundo término es el dominante en régimen turbulento (17).

$$\frac{\Delta P_t}{L_t} = 150 \cdot \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \cdot \frac{\nu_{0t} \cdot \mu_{mezcla}}{D_p^2 \cdot \phi_s^2} + 1,75 \cdot \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^3} \cdot \frac{\rho_{mezcla} \cdot \nu_{0t}^2}{D_p \cdot \phi_s} \quad \text{Ecuación 35}$$

Siendo ΔP_t la caída de presión a través de la longitud (L_t) de cada tubo, ε la porosidad del lecho, ν_{0t} la velocidad de la mezcla líquida por el interior de cada tubo si estos se encontraran vacíos, μ_t la viscosidad media del fluido, ρ_t la densidad media del fluido, D_p el diámetro de partícula y ϕ_s la esfericidad de las partículas. El valor de la esfericidad de las partículas empleadas, así como su diámetro, fue obtenido en el apartado de 2. *Selección y caracterización del catalizador*.

La viscosidad de la mezcla reaccionante varía a medida que transcurren las reacciones del sistema reactivo. Se decide emplear una viscosidad calculada como la media entre los valores obtenidos a la entrada y salida del reactor. Se sigue el mismo proceder con la densidad. A partir del dimensionamiento de los tubos es posible obtener, utilizando la Ecuación 36, el valor de la velocidad que tendría la mezcla reaccionante por su interior de no encontrarse estos rellenos con el catalizador.

$$\nu_0 = \frac{\text{Caudal}}{\text{Sección}} = \frac{\frac{\dot{m}}{\rho_{mezcla}}}{n_t \cdot \frac{\pi \cdot D_{it}^2}{4}} \quad \text{Ecuación 36}$$

Siendo \dot{m} el caudal másico de mezcla que circula por el interior del reactor R-101. En la Tabla 14 se muestran los resultados obtenidos del cálculo de la caída de presión.

Tabla 14. Valores para el cálculo de la pérdida de carga en tubos

Parámetro	Valor
L_t, m	7,32
ε	0,40
$\mu_{mezcla}, kg/m \cdot s$	$1,56 \cdot 10^{-4}$
D_p, mm	3,11
$\rho_{mezcla}, kg/m^3$	775,02
$\dot{m}, kg/s$	59,07
D_{it}, mm	53
$\nu_{0t}, m/s$	0,06
n_t	573
$\Delta P_t, bar$	0,28

En la Tabla 15 se muestran las recomendaciones (1) de valores admisibles de caídas de presión para líquidos y que pueden ser utilizados como guía dado que estos normalmente proporcionan diseños próximos al óptimos. Recordando que la presión establecida en el interior de los tubos es de 28 bar, la pérdida de carga es de un 1%. Esta caída de presión es despreciable y, por consiguiente, no supone un obstáculo, pues se encuentra dentro de los valores permisibles mostrados en la Tabla 15.

Tabla 15. Valores admisibles de caída de presión para líquidos. Fuente: (1)

Viscosidad	Caída de presión admisible
$<10^{-3}$ kg/m s	0,35 bar
$10^{-3} - 10^{-2}$ kg/m s	0,5 – 0,7 bar

Por último, en lo relativo a los tubos, debe calcularse el coeficiente de película, comúnmente conocido como coeficiente de convección. El valor de este coeficiente depende no solo de las propiedades físicas del fluido sino también de su localización. Por consiguiente, no se trata de una propiedad del fluido: su valor se determina de manera experimental y está condicionado por la naturaleza del movimiento del fluido, la geometría de la superficie y las propiedades y velocidad del fluido. Así, para proceder a su cálculo, deben hallarse una serie de números adimensionales. Es necesario determinar el número de Reynolds de partícula para clasificar el tipo de flujo. Este número, calculado con la Ecuación 37 representa la relación entre las fuerzas de inercia y las viscosas en el entorno de las partículas del lecho empacado.

$$Re_p = \frac{D_p \cdot \rho_{mezcla} \cdot v_{0t}}{\mu_{mezcla}} \quad \text{Ecuación 37}$$

Asimismo, resulta necesario la determinación de la relación entre la difusividad de momento y la difusividad térmica. Esta relación es definida a través del número de Prandt y puede calcularse mediante la Ecuación 38.

$$Pr_t = \frac{C_{p,mezcla} \cdot \mu_{mezcla}}{k_{f,mezcla}} \quad \text{Ecuación 38}$$

Siendo, Pr_t el número Prandt para el fluido que circula por tubos, $C_{p,mezcla}$ el calor específico a presión constante de la mezcla calculado como un valor medio entre el valor de entrada y salida de los tubos obtenido empleando el simulador *Aspen Hysys*. De igual forma se calcula la conductividad media de la mezcla, $k_{f,mezcla}$. A continuación, es posible proceder a la obtención del coeficiente en cuestión mediante el empleo del número adimensional de Nusselt, el cual representa la relación existente entre el calor que se transfiere por el efecto de la convección a través del fluido y el que sería transferido de solamente existir conducción. Han sido desarrolladas diferentes correlaciones empíricas para el cálculo de este número adimensional, debiendo aplicarse aquella que haya sido obtenida en unas condiciones lo más similares posibles a las que

se dan en el interior de los tubos empacados del presente reactor en proceso de diseño. Para el cálculo del número de Nusselt del flujo a través de las partículas del lecho se decidió utilizar la correlación dada por la Ecuación 39 (18).

$$Nu = \frac{D_p \cdot h_t}{k_{f,mezcla}} = 2 + 0,6 \cdot Re^{0,5} \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \quad \text{Ecuación 39}$$

Siendo Nu el número de Nusselt y h_t el coeficiente de película en el interior de los tubos. La aplicación de esta correlación se encuentra restringida a Re_p comprendidos entre 1 y 70000 y números Prandtl entre 0,6 y 400. Los valores obtenidos al realizar los correspondientes cálculos se muestran en la Tabla 16. Asimismo, se verifica que los parámetros que condicionan la aplicación de la correlación para el número de Nusselt se encuentran dentro de los intervalos permitidos.

Tabla 16. Valores para el cálculo del coeficiente de convección en tubos

Parámetro	Valor
D_p, mm	3,11
$\rho_{mezcla}, kg/m^3$	775,02
$v_{0t}, m/s$	0,06
$\mu_{mezcla}, kg/m \cdot s$	$1,56 \cdot 10^{-4}$
Re_p	933,69
$C_{pmezcla}, J/kg \cdot ^\circ C$	3672,46
$k_{f,mezcla}, W/m \cdot K$	0,19
Pr_t	4,4
Nu	32,05
$h_t, W/m^2 \cdot ^\circ C$	1960

Es necesario verificar que el coeficiente de película tenga un valor comprendido en el rango predicho por la bibliografía (Tabla 17). Por el interior de los tubos circula la mezcla reaccionante en fase líquida y por convección forzada. Bajo estas condiciones, se considera adecuado el coeficiente de convección obtenido.

Tabla 17. Valores típicos del coeficiente de convección. Fuente: (19)

Condiciones	$h, W/m^2 \cdot ^\circ C$
Convección natural:	
Gases	2 - 25
Líquidos	50 - 1000
Convección forzada:	
Gases	25 - 250
Líquidos	100 - 20000
Convección con cambio de fase:	
Ebullición o condensación	2500 - 100000

10.2. Diseño de la carcasa

Conocidas las dimensiones de los tubos, se procede a determinar el diámetro de la carcasa. La carcasa puede definirse como un tubo de gran diámetro que envuelve el haz de tubos internos. La carcasa se encuentra cerrada en ambos extremos por una placa portamangas (comúnmente conocida como *tubesheet*). Para obtener el diámetro de carcasa necesario, se procede a definir la disposición de los tubos, el *pitch*, el diámetro del haz de tubos y la claridad.

La carcasa resulta ser la parte más costosa de la configuración *shell & tubes*. El coste de este equipo presenta una gran sensibilidad al diámetro de carcasa. Para determinar su diámetro se hace uso de las ecuaciones aproximadas presentes en la literatura. En primer lugar, debe calcularse el diámetro del haz de tubos. Para ello se emplea la Ecuación 40.

$$D_b = D_{ot} \cdot \left(\frac{n_t}{K_1} \right)^{1/n_1} \quad \text{Ecuación 40}$$

Donde D_b es el diámetro del haz de tubos, d_o el diámetro externo de los tubos, N_t el número total de tubos y K_1 y n_1 son constantes cuyo valor depende de la disposición de los tubos y el número de pasos, como se muestra en la Tabla 18.

Tabla 18. Valores de las constantes para calcular el diámetro del haz de tubos. Fuente: (1)

Triangular pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
K_1	0.319	0.249	0.175	0.0743	0.0365
n_1	2.142	2.207	2.285	2.499	2.675
Square pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
K_1	0.215	0.156	0.158	0.0402	0.0331
n_1	2.207	2.291	2.263	2.617	2.643

En este punto es necesario definir la disposición deseada de los tubos. Las dos disposiciones más habituales se presentan en la Figura 10. El patrón triangular permite una mejor transferencia del calor, sin embargo, la caída de presión será superior a la obtenida en disposición cuadrada. El patrón cuadrado es empleando cuando se trata con fluidos sucios y se hace necesaria la limpieza del exterior de los tubos.

Dado que en este caso se emplea por carcasa un fluido que puede ser considerado como limpio (se trata de agua) así como la recomendación heurística de realizar el diseño empleando inicialmente una disposición triangular, esta es la seleccionada. No obstante, deberá ser comprobada que la pérdida de carga obtenida en carcasa no sea excesiva.

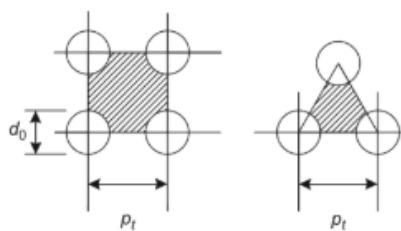


Figura 10. Disposiciones típicas de tubos. Fuente: (1)

El *pitch* recomendado, en otras palabras, la distancia entre los centros de los tubos es 1,25 veces el diámetro exterior de los tubos. Por tanto, su valor se obtiene empleando la Ecuación 41.

$$p_t = 1,25 \cdot D_{ot} \quad \text{Ecuación 41}$$

Asimismo, es posible calcular el número de tubos en la fila central, en otras palabras, en el ecuador de la carcasa empleando la Ecuación 42.

$$\text{Tubos en la fila central} = \frac{D_b}{p_t} \quad \text{Ecuación 42}$$

A continuación, se procede con el cálculo de la claridad, es decir, la distancia comprendida entre el exterior del haz de tubos y el diámetro interior de carcasa. Cierta claridad es necesaria para facilitar la extracción e inserción del haz de tubos de tal forma que se garantice el correcto mantenimiento del equipo. Para esto es necesaria previamente definir el tipo de cabezal empleado. A nivel industrial es común el empleo del tipo anillo partido con cabezal flotante (*Split-ring floating head*), pues proporciona mayores facilidades a la hora de realizar el mantenimiento del equipo al dar acceso al exterior de los tubos. Sin embargo, este diseño no es recomendable para configuraciones con un solo paso de tubos por carcasa, como resulta el caso. Su utilización haría necesario instalar bridas especiales en la cubierta de la carcasa. Por esta razón se opta por seleccionar un cabezal fijo a ambos lados de la carcasa. (20)

Siguiendo la designación TEMA para intercambiadores de calor de carcasa y tubos, el reactor R-101 adoptará la configuración tipo BEM (*Bonnet - One pass shell - Fixed tubesheet*). En el plano detallado del equipo será posible ver de forma más ampliada su estructura.

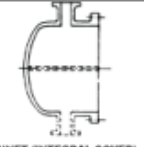
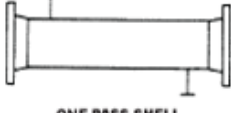
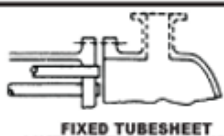
	FRONT END STATIONARY HEAD TYPES		SHELL TYPES		REAR END HEAD TYPES
B		E		M	
	BONNET (INTEGRAL COVER)		ONE PASS SHELL		FIXED TUBESHEET LIKE "B" STATIONARY HEAD

Figura 11. Configuración de carcasa y tubos seleccionada para el reactor R-101. Fuente: (15)

Dado que en la Figura 12 solo se alcanzan diámetros de haz de tubos de 1,2 m y el valor obtenido es superior, debe realizarse una regresión lineal a partir de los datos facilitados en la citada figura, obteniendo así la Ecuación 43 para cabezales fijos.

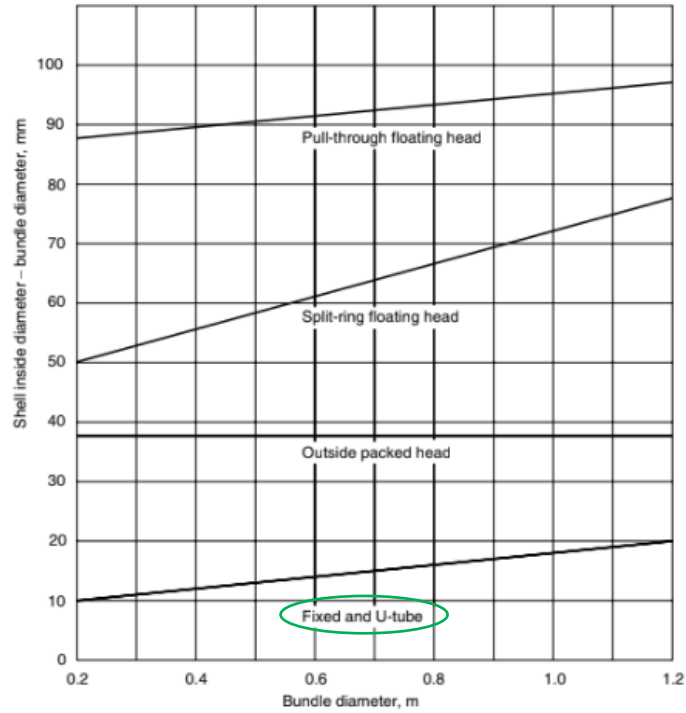


Figura 12. Claridad en intercambiadores de calor para distintos tipos de cabezales. Fuente: (1)

$$Claridad(m) = 0,01 \cdot D_b + 0,008 \quad \text{Ecuación 43}$$

De esta forma, es posible determinar el diámetro interno de la carcasa mediante el empleo de la Ecuación 44.

$$D_{is} = D_b + 2 \cdot Claridad \quad \text{Ecuación 44}$$

Los cálculos realizados para conocer el diámetro interno de carcasa se encuentran recogidos en la Tabla 19.

Tabla 19. Parámetros para el cálculo del diámetro interno de carcasa

Parámetro	Valor
D_{ot}, mm	60
n_t	573
K_1	0,319
n_1	2,142
p_t, mm	75
D_b, m	1,98
Tubos en la fila central	26
Claridad, mm	30
D_{is}, m	2,04

Siguiendo el estándar TEMA, como carcasa pueden emplearse tuberías estándar hasta diámetros internos de 600 mm. De sobrepasar estas dimensiones, como resulta en este caso, la carcasa se elabora enrollando y soldando una placa.

En el diseño de la carcasa son de especial relevancia los deflectores, conocidos también como *baffles*. Estos son dispositivos que dirigen el fluido de la carcasa a través del exterior de los tubos. Se trata de placas circulares, perforadas (para dejar pasar los tubos a su través) y presentan un diámetro similar a la carcasa. Se les realiza un corte horizontal o vertical y los deflectores consecutivos se instalan rotándolos 180°.

Una de las funciones principales de los *baffles* es dar soporte a los tubos, proporcionando suficiente rigidez para prevenir la pérdida de firmeza y el daño por vibraciones mecánicas. Además, también son utilizados para dirigir el flujo con el patrón deseado a través de la carcasa. El tipo más común de deflectores es el tipo segmental, por proporcionan los mayores coeficientes de transferencia de calor, así como mayor grado de turbulencia.

El fluido de carcasa debe seguir el recorrido mostrado en la Figura 13 para alcanzar la boquilla de salida. Asimismo, es posible observar como la velocidad del fluido que circula por carcasa tiene una componente perpendicular y otra paralela al eje de los tubos.

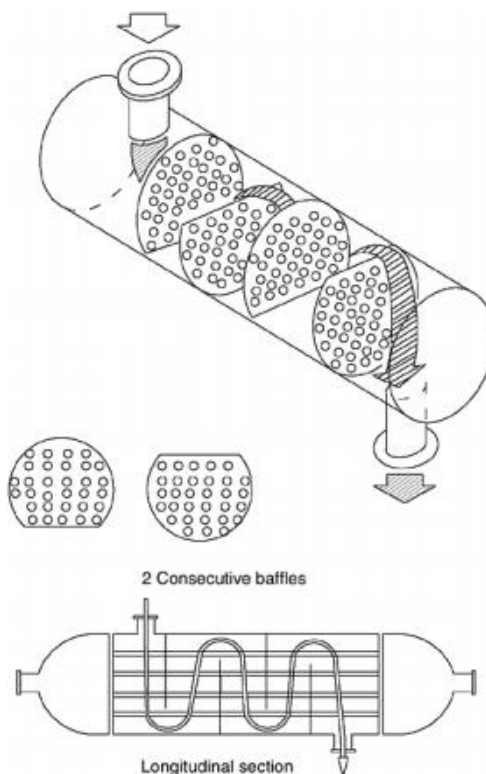


Figura 13. Deflectores segmentados. Fuente: (20)

El corte de los deflectores afecta directamente al coeficiente de convección y a la caída de presión. El empleo de cortes demasiado largos o cortos llevará a la formación de remolinos y espacios

mueritos. En los casos donde no existe cambio de fase en el lado de la carcasa, se consideran como óptimos cortes del 20 al 25% del diámetro del *baffle*. Por esta razón, se selecciona para el presente diseño un corte del 25%.

Resulta también de interés el espaciado entre cada uno de los deflectores colocados en la carcasa. Los rangos de espaciado utilizados son entre 0,2 y 1 veces el diámetro interno de carcasa. Para el presente diseño, se selecciona un espaciado equivalente al 72% del diámetro de carcasa. Como resulta lógico, el número de deflectores dispuestos se representa en la Ecuación 45.

$$N_{baffles} = \frac{L_t}{L_b} - 1 \quad \text{Ecuación 45}$$

Donde $N_{baffles}$ representa el número de deflectores, L_t la longitud de la carcasa y L_b el espaciado existente entre cada *baffle*. El patrón de flujo del fluido a través de una carcasa con *baffles* segmentados es compleja y conlleva una dificultad superior que para el caso de los tubos a la hora de predecir el coeficiente de convección y la caída de presión. Se seguirá el Método de Kern, basado en el trabajo experimental sobre intercambiadores comerciales para obtener predicciones satisfactorias del coeficiente de transmisión de calor en diseños estándar. También se emplea para predecir la caída de presión, aunque el resultado será menos satisfactorio que para la transferencia de calor dado que se ve en mayor medida afectada por las desviaciones del flujo.

En primer lugar, se procede al cálculo del área de flujo cruzado para la hipotética fila de tubos en el ecuador de la carcasa empleando la Ecuación 46.

$$A_s = \frac{D_{is} \cdot L_b \cdot (p_t - d_{ot})}{p_t} \quad \text{Ecuación 46}$$

Siendo A_s el área de flujo cruzado, D_{is} el diámetro interno de carcasa, p_t el pitch de los tubos y d_{ot} su diámetro externo. A continuación, se determina la velocidad másica y lineal del agua que circula por carcasa empleando cada una de las ecuaciones siguientes, respectivamente.

$$G_s = \frac{m_s}{A_s} \quad \text{Ecuación 47}$$

$$u_s = \frac{G_s}{\rho_s} \quad \text{Ecuación 48}$$

Donde m_s representa el flujo másico de agua circulando por carcasa, G_s la velocidad másica de carcasa, A_s el área de flujo cruzado, ρ_s la densidad del agua a la temperatura media en carcasa y u_s la velocidad lineal. Para determinar el valor de la densidad media del agua se hace uso de correlaciones dadas en la bibliografía (14) que determinan la densidad de líquidos en función de la temperatura. Así, es empleada la Ecuación 49.

$$\rho \text{ (kg/m}^3\text{)} = \frac{C_1}{C_2^{1 + \left(1 - \frac{T(K)}{C_3}\right)^{C_4}}} \quad \text{Ecuación 49}$$

Los valores de las constantes se presentan en la Tabla 20.

Tabla 20. Constantes para calcular la densidad del agua. Fuente: (14)

C1	C2	C3	C4
5,459	0,30542	647,13	0,081

El tercer paso consiste en determinar el diámetro equivalente de carcasa, también denominado diámetro hidráulico. Para el caso de una disposición de *pitch* triangular se hace uso de la Ecuación 50.

$$d_e = \frac{1,1 \cdot (p_t^2 - 0,917 \cdot d_{ot}^2)}{D_{ot}} \quad \text{Ecuación 50}$$

Los parámetros calculados hasta este punto se recogen en la Tabla 21.

Tabla 21. Cálculos para determinar la velocidad lineal de carcasa y el diámetro equivalente de carcasa

Parámetro	Valor
$p_t, \text{ mm}$	75
$D_{ot}, \text{ mm}$	60
$L_b, \text{ m}$	1,47
$L_t, \text{ m}$	7,32
$N_{baffles}$	4
$D_{is}, \text{ m}$	2,04
$A_s, \text{ m}^2$	0,60
$G_s, \text{ kg/s m}^2$	330,41
$m_s, \text{ kg/s}$	197,3
$\rho_s, \text{ kg/m}^3$	996
$u_s, \text{ m/s}$	0,33
$d_e, \text{ mm}$	43

En la bibliografía (1) se presentan valores típicos de velocidades en carcasa para este tipo de diseños, y que se recogen en la Tabla 22. Puesto que la velocidad lineal obtenida se encuentra en el rango de diseño típico, se considera aceptable.

Tabla 22. Velocidades típicas para líquidos en intercambiadores tipo carcasa-tubos. Fuente: (1)

Velocidad de diseño típica	
Carcasa	0,3-1 m/s

Conocidos los anteriores valores, se puede estimar el número de Reynolds del lado de carcasa con la Ecuación 51.

$$Re_s = \frac{G_s \cdot d_e}{\mu_s} \quad \text{Ecuación 51}$$

Para determinar el Reynolds resulta necesario calcular la viscosidad del agua. Se decide emplear la correlación definida para líquidos en la bibliografía (1) y mostrada en la Ecuación 52.

$$\mu \left(mN \cdot \frac{s}{m^2} \right) = 10^{A \cdot \left(\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{B} \right)} \quad \text{Ecuación 52}$$

Los valores de las constantes para el agua se muestran en la Tabla 23.

Tabla 23. Constantes del agua líquida para calcular la viscosidad. Fuente: (1)

A	B
658,25	283,16

Los valores para hallar el número Reynolds del fluido que circula por la carcasa se muestran en la Tabla 24. La viscosidad fue calculada a la temperatura media del fluido refrigerante.

Tabla 24. Valores para el cálculo del número Reynolds por carcasa

Parámetro	Valor
$G_s, kg/s \cdot m^2$	330,41
d_e, m	0,043
$\mu_s, Pa \cdot s$	$7,32 \cdot 10^{-4}$
Re_s	$9,21 \cdot 10^5$

A partir del Reynolds obtenido y considerando el corte de deflectores previamente seleccionado (25%), haciendo uso de las Figura 14 y Figura 15 se obtienen los valores de los factores de transferencia de calor y fricción respectivamente.

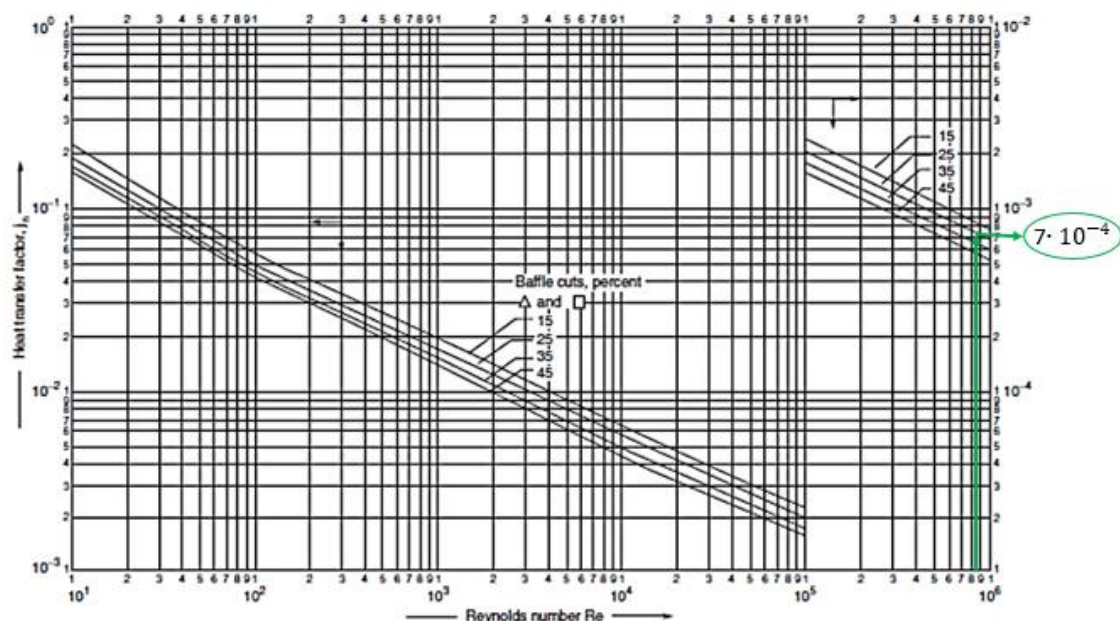


Figura 14. Factor de transferencia de calor para el lado de carcasa y deflectores segmentados. Fuente: (1)

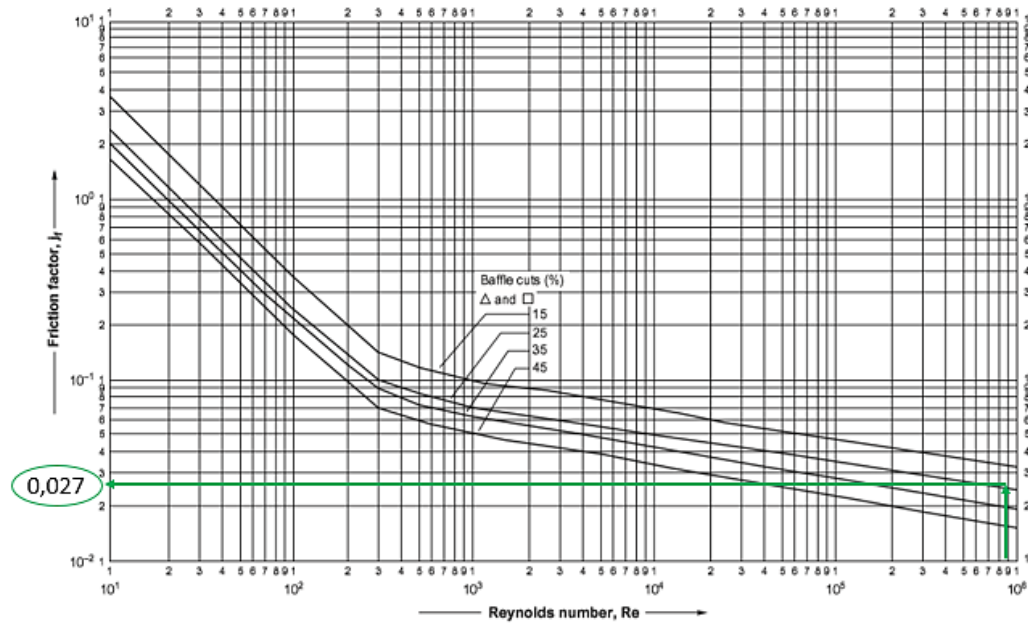


Figura 15. Factor de fricción para el lado de carcasa y defletores segmentados. Fuente: (1)

Llegado este punto, se dispone de toda la información necesaria para el cálculo de la caída de presión en el lado de la carcasa a partir de la Ecuación 53.

$$\Delta P_s = 8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{D_s}{d_e}\right) \cdot \left(\frac{L_t}{l_b}\right) \cdot \frac{\rho_s \cdot u_s^2}{2} \cdot \left(\frac{\mu_s}{\mu_w}\right)^{-0,14} \quad \text{Ecuación 53}$$

Siendo ΔP_s la caída de presión en carcasa, j_f el factor de fricción, D_{is} el diámetro interno de carcasa, d_e su diámetro equivalente, L_t la longitud de los tubos, l_b el espacio entre cada uno de los defletores, ρ_s la densidad media de la mezcla, u_s la velocidad lineal por carcasa, μ_s la viscosidad media del agua circulando en la carcasa y μ_w la viscosidad a la temperatura de la pared. Inicialmente se desprecia el último término de la Ecuación 53, es decir, el término de corrección de la viscosidad dado que su valor suele ser insignificante para fluidos con baja viscosidad. Más adelante se procederá a la determinación de si esta suposición es correcta. Los datos utilizados y los resultados de los cálculos realizados se encuentran recogidos en la Tabla 25.

Tabla 25. Valores para el cálculo de la caída de presión en carcasa

Parámetro	Valor
j_f	0,027
D_s, m	2,04
d_e, mm	43
L_t, m	7,32
l_b, m	1,47
$\rho_s, kg/m^3$	996
$u_s, m/s$	0,33
$\Delta P_s, kPa$	2,80

Volviendo a la Tabla 15 donde se muestran los valores típicos de caída de presión para líquidos se verifica que la pérdida de carga en el lado de carcasa es aceptable. A continuación, de manera análoga a lo realizado con los tubos y empleando la Ecuación 54, se determina el número de Prandtl del lado de la carcasa.

$$Pr_s = \frac{Cp_s \cdot \mu_s}{k_{f_s}} \quad \text{Ecuación 54}$$

Donde Cp_s es el calor específico del agua a la temperatura media que circula por carcasa calculado mediante la correlación expresada en la Ecuación 25 con los coeficientes para el agua, μ_s es la viscosidad a esa misma temperatura y k_{f_s} la conductividad media de la mezcla obtenida empleando el simulador *Aspen Hysys*. Conociendo el valor del número de Prandtl, el Reynolds anteriormente calculado y el factor de transferencia de calor es posible hallar el coeficiente de película del lado de la carcasa despejando su término de la Ecuación 55.

$$Nu = \frac{h_s \cdot d_e}{k_{f_s}} = j_n \cdot Re_s \cdot Pr_s^{0,33} \cdot \left(\frac{\mu_s}{\mu_w}\right)^{0,14} \quad \text{Ecuación 55}$$

Los valores para los cálculos y los resultados obtenidos se recogen en la Tabla 26.

Tabla 26. Valores para el cálculo del coeficiente de convección del lado de carcasa

Parámetro	Valor
$T_{\text{media en carcasa}}, ^\circ C$	29
$k_{f_s}, W/m K$	0,55
d_e, mm	43
j_n	$7 \cdot 10^{-4}$
Re_s	$9,21 \cdot 10^5$
$Cp_s, kJ/kg K$	4,19
$\mu_s, Pa \cdot s$	$7,32 \cdot 10^{-4}$
Pr_s	5,57
Nu	1136,83
$h_s, W/m^2 K$	14540

El valor de coeficiente de película obtenido para el agua que circula por la carcasa en estado líquido y por convección forzada se encuentra dentro del intervalo admisible para estas condiciones (en la Tabla 17 se presentaron los rangos típicos de variación de este coeficiente).

Es posible observar que en la anterior expresión aparece el mismo factor de corrección de la viscosidad presente en la expresión del cálculo de la caída de presión. Para la estimación inicial realizada, se supuso que dicho factor es despreciable, pues como anteriormente se mencionó, suele ser insignificante para líquidos no viscosos, siendo este el caso del agua. Se determina si dicha estimación es acertada calculando el valor del término. Para ello, en primer lugar, se obtiene la temperatura de la pared externa de los tubos haciendo uso de la Ecuación 56.

$$t_w = t + \frac{U_{0,asumido} \cdot (T - t)}{h_s} \quad \text{Ecuación 56}$$

Siendo, t y T las temperaturas medias de los fluidos del lado de los tubos y carcasa, respectivamente, $U_{0,asumida}$ el coeficiente global de transmisión de calor asumido, t_w la temperatura de pared estimada y h_s el coeficiente de convección por el lado de carcasa. A continuación, empleando la correlación previamente definida por la Ecuación 52, se calcula el valor de la viscosidad del agua a la temperatura de la pared recién calculada. De esta manera se conocen los dos términos necesarios para determinar el valor de este factor de corrección definido en la Ecuación 57.

$$\text{Factor de corrección de viscosidad} = \left(\frac{\mu_s}{\mu_w} \right)^{0,14} \quad \text{Ecuación 57}$$

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 27.

Tabla 27. Cálculo del factor de corrección por viscosidad

Parámetro	Valor
$t, ^\circ C$	55
$T, ^\circ C$	19,5
$h_s, W/m^2 \cdot ^\circ C$	14540
$\mu_s, Pa \cdot s$	$7,32 \cdot 10^{-4}$
$U_{0,asumido}, W/m^2 \cdot ^\circ C$	770
$t_w, ^\circ C$	53
$\mu_w, Pa \cdot s$	$4,9 \cdot 10^{-4}$
Factor de corrección por viscosidad	1,05

Como cabía de esperar, por ser el agua un fluido poco viscoso, el factor calculado es muy pequeño y la decisión de despreciarlo está correctamente justificada. De aplicar esta corrección se aumentaría ligeramente el valor del coeficiente de convección, y por consiguiente sería favorable para la transmisión de calor. A mayores, también daría un pequeño descenso del valor estimado de caída de presión.

En mayor o menor medida, los fluidos tanto de proceso como de servicio ensucian la superficie de transferencia de calor. El material que se deposita normalmente posee una baja conductividad térmica y tiende a reducir el coeficiente global de transferencia de calor. Por consiguiente, resulta necesario sobredimensionar el reactor con el objetivo de permitir cierta reducción del rendimiento del equipo. El efecto del ensuciamiento se incluye en el diseño mediante los llamados factores internos (para el fluido que circula por tubos) y externos (para el fluido de carcasa) de ensuciamiento. Su valor se estima a partir de experiencias pasadas. Para el presente caso se utilizarán los factores de ensuciamiento dados por fuentes bibliográficas (Tabla 28) para el agua de enfriamiento y líquidos orgánicos.

Tabla 28. Valores típicos de factores de ensuciamiento. Fuente: (1)

Fluid	Coefficient (W/m ² °C)	Factor (resistance) (m ² °C/W)
River water	3000–12,000	0.0003–0.0001
Sea water	1000–3000	0.001–0.0003
Cooling water (towers)	3000–6000	0.0003–0.00017
Towns' water (soft)	3000–5000	0.0003–0.0002
Towns' water (hard)	1000–2000	0.001–0.0005
Steam condensate	1500–5000	0.00067–0.0002
Steam (oil free)	4000–10,000	0.0025–0.0001
Steam (oil traces)	2000–5000	0.0005–0.0002
Refrigerated brine	3000–5000	0.0003–0.0002
Air and industrial gases	5000–10,000	0.0002–0.0001
Flue gases	2000–5000	0.0005–0.0002
Organic vapors	5000	0.0002
Organic liquids	5000	0.0002
Light hydrocarbons	5000	0.0002
Heavy hydrocarbons	2000	0.0005
Boiling organics	2500	0.0004
Condensing organics	5000	0.0002
Heat transfer fluids	5000	0.0002
Aqueous salt solutions	3000–5000	0.0003–0.0002

Así, es posible determinar el coeficiente global de transmisión calor a partir de la relación recíproca existente con la resistencia global a la transferencia de calor, resultado de la suma de varias resistencias individuales. Esta relación se representa mediante la Ecuación 58, mostrada a continuación.

$$U_o = \frac{1}{\frac{1}{h_s} + \frac{1}{h_{sd}} + \frac{D_{ot} \cdot \ln\left(\frac{D_{ot}}{D_{it}}\right)}{2 \cdot k_w} + \frac{D_{ot}}{D_{it}} \cdot \frac{1}{h_{td}} + \frac{D_{ot}}{D_{it}} \cdot \frac{1}{h_t}} \quad \text{Ecuación 58}$$

Siendo h_s el coeficiente de convección para el lado de carcasa, h_t para el caso de los tubos, h_{sd} y h_{td} los coeficientes de ensuciamiento del lado de carcasa y tubos respectivamente y k_w la conductividad del acero inoxidable AISI-304 (este es el material que se selecciona para la construcción del reactor R-101 en el apartado 11. *Selección del material*, en la página 39). El valor de este último parámetro se selecciona de la Figura 16.

Metal	Temperature (°C)	k_w (W/m °C)
Aluminium	0	202
	100	206
Brass (70 Cu, 30 Zn)	0	97
	100	104
	400	116
Copper	0	388
	100	378
Nickel	0	62
	212	59
Cupro-nickel (10 per cent Ni)	0–100	45
Monel	0–100	30
Stainless steel (18/8)	0–100	16
Steel	0	45
	100	45
	600	36
Titanium	0–100	16

Figura 16. Conductividad de metales. Fuente: (1)

El coeficiente global estimado debe ser ligeramente superior al asumido y empleado en la Ecuación 32 para el cálculo del área de transferencia necesaria. Los valores seleccionados y calculados se disponen en la Tabla 29.

Tabla 29. Valores para el cálculo del coeficiente global de transmisión de calor

Parámetro	Valor
$h_s, W/m^2\ ^\circ C$	14540
$h_t, W/m^2\ ^\circ C$	1959
$h_{sd}, W/m^2\ ^\circ C$	6000
$h_{td}, W/m^2\ ^\circ C$	5000
D_{ot}, mm	60
D_{it}, mm	53
$k_w, W/m\ ^\circ C$	16
$U_{0,calculado} W/m^2\ ^\circ C$	785,95

Se calcula el error porcentual entre el valor del coeficiente global asumido y el calculado mediante la Ecuación 58. El error porcentual obtenido es muy pequeño y, por tanto, se considera correcto asumir $770\ W/m^2\ ^\circ C$ como coeficiente global de transmisión de calor. Asimismo, el valor calculado es superior al asumido por lo que de esta manera se garantiza la disponibilidad de área suficiente para que tenga lugar la transferencia de calor deseada que permita mantener el interior de los tubos a la temperatura que garantice la conversión y selectividad deseadas.

$$e\% = \frac{U_{o,calculado} - U_{o,asumido}}{U_{o,asumido}} = \frac{785,95 - 770}{770} = 2,07\%$$

En conclusión, puesto que la diferencia entre ambos coeficientes globales es despreciable, se considera acertado el valor inicial asumido. Asimismo, la caída de presión obtenida tanto en tubos como en carcasa se encuentra dentro de los valores recomendables. Además, los coeficientes de convección calculados están situados en los límites establecidos por la bibliografía para las condiciones de operación descritas anteriormente. Por consiguiente, las dimensiones consideradas para el diseño del reactor R-101 se estiman apropiadas.

11. Selección del material

A la hora de realizar la selección de un material de construcción deben considerarse los siguientes aspectos fundamentales: el coste, la compatibilidad con los fluidos contenidos, la resistencia a la corrosión y a las condiciones de operación (21).

Los recipientes a presión se diseñan, por seguridad, siguiendo dos criterios:

- Deformación antes de ruptura: normalmente empleado para recipientes de tamaño reducido.

- Vertido antes de ruptura: utilizado en recipiente de mayor tamaño, como es el caso del reactor R-101 y por consiguiente será el seleccionado. Con este criterio se asegura que al formarse una grieta lo suficientemente larga como para penetrar ambas superficies del recipiente, esta sea todavía estable y pueda ser detectada la fuga fácilmente.

Siguiendo la metodología *Ashby* para la selección del material de la carcasa, deben establecerse los requerimientos de diseño para recipientes a presión (Tabla 30).

Tabla 30. Requerimientos de diseño para la carcasa del reactor R-101

Función	Garantizar el mantenimiento de la presión de forma segura
Limitaciones	Radio del recipiente especificado Cuestiones económicas
Objetivo	Maximizar la seguridad con el criterio verter antes de romper
Variable libre	Elección del material

El índice de material (M_1) empleado para el criterio seleccionado (vertido antes de ruptura) se muestra en la Ecuación 59. La forma más segura de contener la presión máxima del recipiente es haciendo uso del material que tenga un mayor valor de este índice.

$$M_1 = \frac{K_{1C}^2}{\sigma_f} \quad \text{Ecuación 59}$$

Siendo K_{1C} la tenacidad a la fractura y σ_f el límite elástico. Trazando una paralela a la recta que tenga como pendiente el índice anterior, en el diagrama de lóbulos de la Figura 17 se obtienen los materiales más idóneos para la construcción del recipiente siguiendo el criterio elegido.

Asimismo, también se busca que el espesor del recipiente sea lo más delgado posible por cuestiones tanto económicas como para que este sea ligero. Es posible conseguir una pared más delgada en aquellos materiales que proporcionen mayor límite elástico. Así se deduce un nuevo índice (M_2) definido en la Ecuación 60 cuyo valor debe maximizarse. Para ello, se emplea el mismo diagrama de lóbulos que para el índice anterior y se traza una línea vertical donde se encuentran límites elásticos superiores, siendo σ_f el límite elástico.

$$M_2 = \sigma_f \quad \text{Ecuación 60}$$

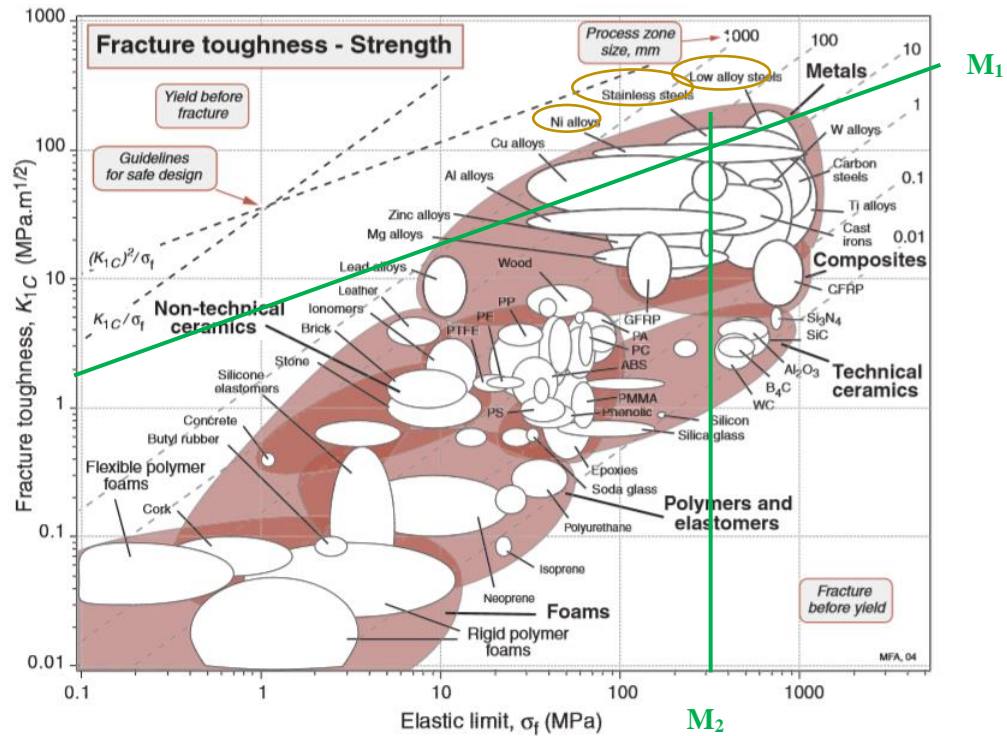


Figura 17. Diagrama de lóbulos: Tenacidad a la fractura vs. Límite elástico. Fuente: (21)

De esta forma, se observa que las aleaciones de níquel, aceros al carbono de baja aleación, así como el acero inoxidable, resultan materiales óptimos para el diseño de la carcasa del reactor en términos de los criterios seleccionados anteriormente.

En lo tocante a los tubos, los requerimientos de diseño para la selección del material se recogen la Tabla 31.

Tabla 31. Requerimientos de diseño para los tubos del reactor R-101

Función	Reactor catalítico con retirada de calor
Limitaciones	El espesor de pared debe poder soportar la diferencia de presión entre el interior y el exterior de los tubos Cuestiones económicas Espesor de tubos especificado
Objetivo	Maximizar el flujo de calor por unidad de área
Variable libre	Elección del material

Siguiendo la metodología *Ashby* descrita en la bibliografía para la selección de materiales en intercambiadores de calor, se desarrolla el índice (M_3) con el que se busca maximizar el flujo de calor por unidad de área de la pared de los tubos del equipo. Este índice se expresa en la Ecuación 61.

$$M_3 = \sigma_f \cdot \lambda$$

Ecuación 61

Siendo λ la conductividad térmica del material y σ_f el límite elástico. Se desea maximizar este índice para que la retirada del calor producido durante las reacciones químicas en el interior de los tubos sea lo más eficiente posible. Los materiales de interés para la construcción de los tubos se encuentran situados en la parte superior de la Figura 18, pues es donde el producto de la conductividad térmica y el límite elástico son superiores. Se considera apropiado el uso de aceros enriquecidos en carbono, aceros de baja aleación, aleaciones de níquel, de cobre, de silicio y aceros inoxidables.

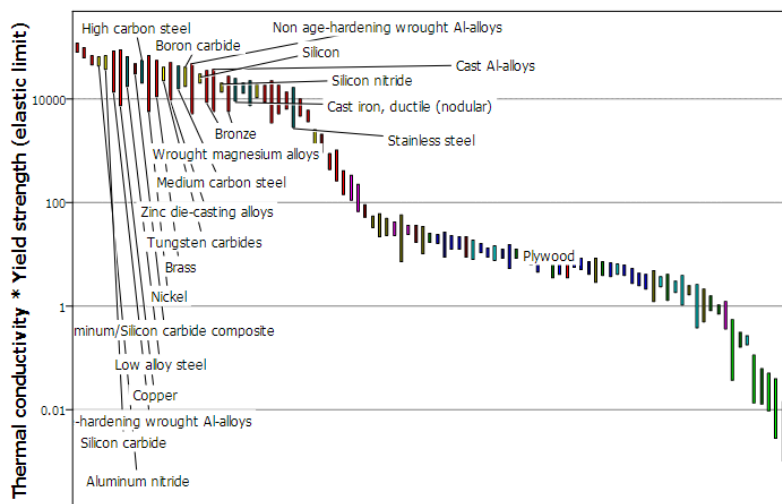


Figura 18. Diagrama de burbujas de la conductividad térmica y el límite elástico. Fuente: (22)

Asimismo, debe ser considerada la compatibilidad de estos materiales con el contenido del reactor. Por esta razón, aunque las aleaciones de acero al carbono, aluminio o cobre tienen un coste considerablemente menor y el flujo de calor por unidad de superficie (índice M_3) es superior, se elige el empleo de aceros inoxidables por proporcionar mayor grado de compatibilidad, tal y como se muestra en la Tabla 32. Del mismo modo, para el caso de carcasa debe considerarse la compatibilidad química del agua con los posibles materiales de construcción, atendiendo a la Tabla 32 no se recomienda la utilización de aceros al carbono y se opta por el empleo de acero inoxidable. Asimismo, aunque el coste inicial será mayor, el gasto por mantenimiento del reactor resultará menor y tendrá mayor vida útil.

Dentro del grupo de los aceros inoxidables destacan los aceros austeníticos. Tienen un contenido en níquel superior al 7%, entre 16-28% en cromo y la composición en carbono es muy baja (23). Por esta razón son muy resistentes a la corrosión y maleables. También presentan buena soldabilidad. La serie 300 es el grupo de acero austenítico más amplio y empleado.

Tras comparar la compatibilidad química (Tabla 32) de los compuestos que se encuentran dentro del reactor con diferentes grados de acero, se decide seleccionar el grado 304 dado que es compatible con todos los compuestos químicos.

Tabla 32. Compatibilidad química de los compuestos químicos del proceso con posibles materiales de construcción. Fuente: (24)

	Acero al carbono	Acero inoxidable grado 304	Acero inoxidable grado 316
Oxígeno	B	A	A
Metanol	A	A	A
Óxido de propileno	B	A	A
Propilenglicol	A	B	B
Propileno	A	B	A
Peróxido de hidrógeno	B	B	A
Agua	D	A	A

Tabla 33. Leyenda de compatibilidad química

Leyenda de compatibilidad química	
A	Excelente
B	Bueno
C	Pobre
D	No recomendable

Aunque el acero de grado 316 resulta mejor por presentar la etiqueta de excelente con todos los productos químicos a excepción del propilenglicol, este al ser más caro (como se observa en la Tabla 34) se descarta por no haber excesiva diferencia en las ventajas respecto al grado 304.

Tabla 34. Comparativa de precios de diferentes grados de acero inoxidable. Fuente: (1)

Acero inoxidable grado 304	Acero inoxidable grado 316
2,92 €/kg	5 €/kg

Por estos motivos, se selecciona acero inoxidable AISI 304 como material de construcción tanto para los tubos como para la carcasa del reactor R-101.

12. Diseño mecánico del equipo

A continuación, se procederá a la realización del diseño mecánico del equipo en cuestión. En este apartado se trata al reactor R-101 como un recipiente sometido presión interna. No existe una definición estricta de qué constituye un recipiente a presión, sin embargo, está generalmente aceptado que cualquier recipiente con un diámetro superior a 150 mm, que se encuentre cerrado y esté sujeto a una diferencia de presión superior a 0,5 bar debe ser diseñado como recipiente a presión (1).

Se seguirán las reglas de construcción de la norma de uso más extendida, elaborada por la Sociedad Americana de Ingenieros Mecánicos: la *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII Div.I*. Esta norma es aplicada a la mayor parte de reactores de proceso, columnas de destilación, separadores, recipientes de almacenamiento a presión e intercambiadores de calor.

En la División 1 se establecen los requisitos aplicables al diseño, fabricación, inspección, ensayo y certificación de los recipientes a presión en los que las presiones internas o externas sean superiores a 15 psi (100 kPa) e inferiores a 3000 psi (20 MPa) y cuyo diámetro interno o altura supere las 6 pulgadas (152 mm). Puesto que el reactor R-101 cumple los requisitos mencionados, se considera adecuada la selección del mencionado código de diseño.

12.1. Presión de diseño

Un recipiente debe diseñarse para soportar la máxima presión a la que podrá verse sometido durante el tiempo de operación. Así, siguiendo el código seleccionado, se establece que el margen de diseño para la presión puede ser un 10% superior o bien 25 psi (1,72 bar) adicionales a la presión de operación manométrica máxima (25). Se selecciona como presión de diseño el mayor valor obtenido haciendo uso de las Ecuación 62 y Ecuación 63. Los valores empleados, así como los resultados obtenidos del cálculo de la presión y temperatura de diseño para carcasa y tubos se recogen en la Tabla 35.

$$P_d(psi) = 25 + P_{op,g} \quad \text{Ecuación 62}$$

$$P_d = 1,1 \cdot P_{op,g} \quad \text{Ecuación 63}$$

12.2. Temperatura de diseño

La resistencia de los metales decrece a medida que aumenta la temperatura, por consiguiente, la tensión máxima permitida dependerá de la temperatura a la que esté sometido el material. Se establece que la temperatura máxima de diseño para el lado de tubos y carcasa será la temperatura de operación más alta esperada en cada lado adicionándole 50°F. (Ecuación 64)

$$T_d(^{\circ}F) = 50 + T_{op,max} \quad \text{Ecuación 64}$$

Los valores empleados, así como los resultados obtenidos del cálculo de la presión y temperatura de diseño se recogen en la Tabla 35.

Tabla 35. Condiciones de diseño para el reactor R-101

	Tubos	Carcasa
Presión de operación manométrica, <i>bar</i>	27	2
Presión de diseño, <i>bar</i>	29,7	3,73
Temperatura de operación, <i>°C</i>	55	32
Temperatura de diseño, <i>°C</i>	65	42

12.3. Espesores de carcasa y tubos

El Código ASME BPV Sec.VIII D.I establece un espesor mínimo de pared de 1,5 mm para asegurar que el recipiente sea suficientemente rígido para soportar su propio peso y cualquier

carga accidental. Este espesor mínimo es independiente de las dimensiones del recipiente y el material de construcción.

Se establece un aumento del espesor calculado de 2 mm para casos donde no se espera una corrosión excesiva. En el caso de trabajar en condiciones severas de corrosión, el incremento deberá ser de 4 mm. Como guía general, el espesor de la pared del recipiente no debe ser inferior a los valores de la Tabla 36, en los que se incluye una tolerancia a la corrosión de 2 mm.

Tabla 36. Espesores mínimos. Fuente: (1)

Diámetro del recipiente, mm	Espesor mínimo, mm
1	5
1 – 2	7
2 – 2,5	9
2,5 – 3	10
3 – 3,5	12

Para carcasas cilíndricas, se determina el espesor mínimo que permita soportar la presión interna haciendo uso de las expresiones que permiten calcular el espesor radial y longitudinal. El espesor elegido para el diseño es el de mayor valor obtenido: el diseño debe realizarse siempre para el peor de los casos. En el cálculo del espesor para tensión radial se emplea la Ecuación 65.

$$t_{radial} = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 1,2 \cdot P_i} \quad \text{Ecuación 65}$$

En el cálculo del espesor para esfuerzo longitudinal se emplea la Ecuación 66.

$$t_{longitudinal} = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E - 0,8 \cdot P_i} \quad \text{Ecuación 66}$$

Donde P_i es la presión de diseño, D_i es el diámetro interno, S es el máximo esfuerzo permisible, E es la eficacia de unión de soldadura y t es el espesor mínimo requerido. Tanto para el caso de los tubos como para la carcasa, se considerará un factor de corrección por corrosión de 2 mm, debido a que se asume que la corrosión no es severa.

Los valores del esfuerzo máximo permisible vienen tabulados en la bibliografía y dependen del material de construcción y la temperatura. En la Figura 19 se muestran valores típicos proporcionados en el Código ASME. Se selecciona el esfuerzo máximo permisible para el acero elegido como material de construcción (acero inoxidable de grado 304) a la temperatura de 300°F (149°C).

Anexo II. Cálculos Justificativos.

Planta de producción de óxido de propileno a partir de peróxido de hidrógeno

Material	Grade	Min Tensile strength (ksi)	Min Yield strength (ksi)	Maximum temperature (°F)	Maximum allowable stress at temperature °F (ksi = 1000 psi)				
					100	300	500	700	900
Carbon steel	A285 Gr A	45	24	900	12.9	12.9	12.9	11.5	5.9
Killed carbon Steel	A515 Gr 60	60	32	1000	17.1	17.1	17.1	14.3	5.9
Low alloy steel 1 ¼ Cr, ½ Mo, Si	A387 Gr 22	60	30	1200	17.1	16.6	16.6	16.6	13.6
Stainless steel 13 Cr	410	65	30	1200	18.6	17.8	17.2	16.2	12.3
Stainless steel 18 Cr, 8 Ni	304	75	30	1500	20.0	15.0	12.9	11.7	10.8
Stainless steel 18 Cr, 10 Ni, Cb	347	75	30	1500	20.0	17.1	15.0	13.8	13.4
Stainless steel 18 Cr, 10 Ni, Ti	321	75	30	1500	20.0	16.5	14.3	13.0	12.3
Stainless steel 16 Cr, 12 Ni, 2 Mo	316	75	30	1500	20.0	15.6	13.3	12.1	11.5

Figura 19. Esfuerzos máximos permisibles. Fuente: (1)

Además, es necesario también seleccionar la eficiencia de la soldadura. El valor empleado de esta eficiencia depende del tipo de junta y el porcentaje radiográfico requerido por el código de diseño. Una eficacia del 100% solo es posible empleando juntas del tipo a tope con doble soldadura y que se someten a un examen radiográfico completo. En el caso de los tubos, se pretende evitar cualquier posible contacto entre el agua de enfriamiento y la mezcla reaccionante y, por tanto, se selecciona un examen radiográfico completo. Respecto a la carcasa, se considera suficiente un grado medio de examen radiográfico, viéndose de esta manera reducidos los costes. Los valores de eficiencia de soldadura empleados para la junta seleccionada se disponen en la Tabla 37.

Tabla 37. Eficacias de soldadura. Fuente: (1)

Tipo de junta	Grado de examen radiográfico		
	Completo	Medio	Ninguno
Junta a tope con doble soldadura	1	0,85	0,7

Llagado este punto, se dispone de los datos necesarios para determinar los espesores requeridos en el diseño. Los datos empleados, así como los resultados obtenidos, se muestran en la Tabla 38.

Tabla 38. Parámetros para el cálculo del espesor de carcasa

Parámetro	Valor
P_i, bar	3,73
D_{is}, m	2,04
S, bar	1034,22
E	0,85
$t_{\text{longitudinal}}, \text{mm}$	1,84
$t_{\text{radial}}, \text{mm}$	4,33
Corrección por corrosión, mm	2
$t_{\text{corregido}}, \text{mm}$	6,33

El valor obtenido de espesor corregido es inferior al valor mínimo establecido en la Tabla 36 para diámetros de carcasa entre 2 y 2,5 m para proporcionar un diseño seguro y considerando el factor de corrección de 2 mm. Por tanto, se selecciona un espesor de carcasa de 9 mm y su diámetro externo resulta de 2,06 m. A continuación, se recogen los cálculos para el caso de los tubos.

Tabla 39. Parámetros para el cálculo del espesor de los tubos

Parámetro	Valor
P_i , bar	29,7
D_{it} , mm	53
S , bar	1034,22
E	1
$t_{longitudinal}$, mm	0,38
t_{radial} , mm	0,77
t_{minimo} , mm	1,5
Corrección por corrosión, mm	2
$t_{corregido}$, mm	3,5

El espesor final obtenido para tubos se corresponde a 3,5 mm, pues ni el espesor radial ni el longitudinal calculados alcanzan el espesor mínimo exigido por el código de diseño. En el apartado 10.1. *Diseño de los tubos*, siguiendo los estándares para tubos de acero inoxidable, se seleccionó un diámetro nominal de 2 pulgadas y cédula 40, siendo el diámetro externo de 60 mm y el espesor 3,5 mm. Puesto que el espesor exigido para el diseño mecánico coincide con el empleado en los tubos seleccionados, se considera apropiado el uso de los actuales tubos. Finalmente, las dimensiones de la carcasa y tubos se recogen en la Tabla 40.

Tabla 40. Dimensiones del reactor R-101

Parámetro	Valor	
	Carcasa	Tubos
$D_{interior}$, m	2,04	0,053
$D_{exterior}$, m	2,06	0,060
t , mm	9	3,5

12.4. Selección y dimensionado de cabezales

Los extremos de los recipientes cilíndricos se encuentran cerrados por cabezales que pueden tener distintas formas. Los más utilizados habitualmente son los cierres planos, los hemisféricos, los elipsoidales, o bien los torisféricos.

Respecto a los cierres planos estos son los más económicos por tener un coste de fabricación más reducido. No obstante, estructuralmente no resultan eficientes como cabezales cuando se trabaja con elevadas presiones (como resulta el caso), pues serían necesarios espesores muy elevados y, por tanto, para estos casos se recomienda el uso de cabezales abombados. A continuación, se

comparan distintos cabezales abombados para la carcasa y se selecciona el más apropiado. En la Figura 20 se muestran los tres tipos de cabezales abombados que serán comparados.

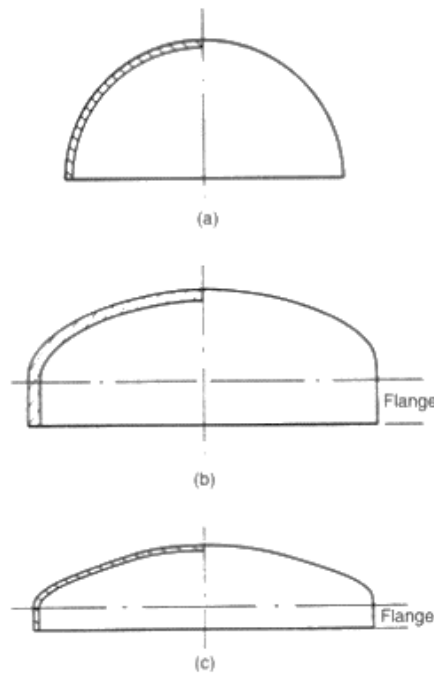


Figura 20. Cabezales abombados más usados: a) Hemisférico b) Elíptico c) Torisféricos. Fuente: (1)

Los cabezales hemisféricos dan buenos resultados cuando se trabaja con presiones elevadas, proporcionan mayor volumen interno y su espesor es la mitad del de carcasa. Sin embargo, resultan más caros para fabricarse y unirse a la carcasa. Su espesor se calcula con la expresión de la Ecuación 67.

$$t = \frac{P_i \cdot D_{is}}{4 \cdot S \cdot E - 0,4 \cdot P_i} \quad \text{Ecuación 67}$$

Los cabezales elípticos son más baratos que los anteriores y proporcionan menor volumen interno. Tienen el mismo espesor que la carcasa y su uso se recomienda cuando las presiones son superiores a 15 bar. Su espesor puede ser obtenido a partir de la Ecuación 68.

$$t = \frac{P_i \cdot D_{is}}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P_i} \quad \text{Ecuación 68}$$

Por último, el cabezal de tipo torisférico es similar al elíptico, pero más sencillo de fabricar y, por consiguiente, resulta el más barato cuando las presiones no superan los 15 bar. Es posible conocer el valor de su espesor con la Ecuación 69.

$$t = \frac{0,885 \cdot P_i \cdot R_c}{S \cdot E - 0,1 \cdot P_i} \quad \text{Ecuación 69}$$

Siendo para las tres expresiones anteriores, P_i la presión de diseño de los tubos (los cabezales están en contacto con la mezcla reaccionante que circula por los tubos), D_{is} el diámetro interno de la carcasa, S el máximo esfuerzo permisible, E la eficacia de soldadura y R_c el radio de la corona, que se asume igual al diámetro interno de carcasa. Se calcula el espesor para cada uno de estos cabezales con las ecuaciones anteriores, optando por un examen radiográfico completo y se adiciona un factor de corrección por corrosión de 2 mm. Los valores de espesores corregidos para cada uno de los cabezales abombados se muestran en la Tabla 41.

Tabla 41. Cálculo de espesores para cabezales abombados

Parámetro	Valor
$P_i, \text{ bar}$	29,7
$S, \text{ bar}$	1034,22
E	1
$D_{is}, \text{ m}$	2,04
Corrección por corrosión, mm	2
$t_{\text{ Hemisférico}}, \text{ mm}$	16,69
$t_{\text{ Elíptico}}, \text{ mm}$	31,38
$t_{\text{ Torisférico}}, \text{ mm}$	54

El cabezal de tipo torisférico queda descartado por presentar un espesor mucho mayor. Esto era de esperar dado que su utilización es recomendable para presiones considerablemente inferiores a la de diseño. Así, considerando los dos cabezales restantes, aunque los requerimientos de material son mayores para el caso de los cabezales elípticos, estos son los seleccionados debido a que en ellos los costes asociados a la construcción y unión no son tan elevados como para los cabezales hemisféricos. De esta manera, el coste superior que supone el empleo de más cantidad de material se ve compensado por el ahorro a la hora de su fabricación e instalación. Además, como se mencionó anteriormente, estos resultan óptimos para trabajar a presiones superiores a 15 bar, como es el caso. Así, tanto el extremo frontal como el trasero tendrán un cabezal tipo elíptico.

El material empleado para la construcción de los cabezales será el mismo que para la carcasa, es decir, acero inoxidable AISI 304. Para dimensionar los cabezales elípticos se requiere conocer la altura del tramo recto (h_1) y la del lado curvado (h_2), el radio de corona (r_1), el radio de la esquina interna (r_2) y la altura total (h_3). Siendo s el espesor calculado anteriormente para el cabezal elíptico, D_i el diámetro interno del cabezal, que se corresponde con el diámetro interno de la carcasa y D_a su diámetro externo. Estos parámetros se ilustran de forma gráfica en la Figura 21.

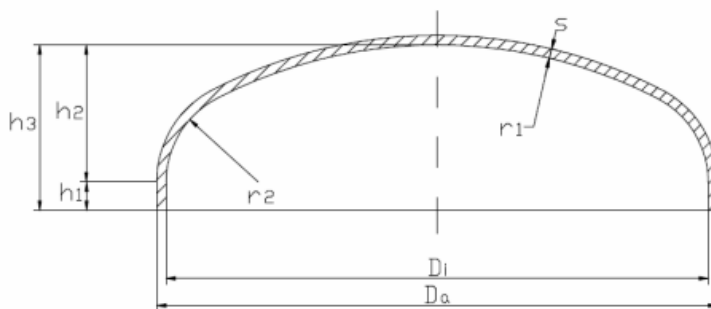


Figura 21. Parámetros para dimensionar un cabezal elíptico con una relación Eje mayor/Eje menor = 2.

Fuente: (26)

Se decide realizar el dimensionamiento del cabezal elíptico con una relación eje mayor respecto eje menor equivalente a 2. Las expresiones empleadas y las dimensiones obtenidas se muestran en la Tabla 42.

Tabla 42. Dimensionamiento del cabezal elíptico. Fuente: (27)

Parámetro	Ecuación	Valor
s, mm	Calculado previamente	31,38
D_i, m	Calculado previamente	2,04
D_a, m	$D_i + 2 \cdot s$	2,10
r_1, m	$0,9 \cdot D_i$	1,84
r_2, m	$0,17 \cdot D_i$	0,35
h_1, m	$3 \cdot s$	0,09
h_2, m	$0,25 \cdot D_i$	0,51
h_3, m	$h_1 + h_2$	0,60

12.5. Análisis de cargas

A parte de las cargas debidas a la presión, los recipientes a presión se encuentran sometidos a otros tipos de cargas. Estos recipientes deben diseñarse de tal forma que soporten la peor combinación de estas cargas sin colapsar. Las principales fuentes de cargas serán calculadas a continuación.

12.5.1. Cargas por peso

Las fuentes más comunes de cargas por peso muerto tienen como origen la carcasa del recipiente, los accesorios, el aislamiento y el peso del líquido en su interior.

El peso de un recipiente cilíndrico con cabezales abombados y un espesor de pared uniforme puede estimarse con la Ecuación 70.

$$W_v = C_w \cdot \pi \cdot \rho_{ss} \cdot D_m \cdot g \cdot (L_t + 0,8 \cdot D_m) \cdot t \quad \text{Ecuación 70}$$

Donde, W_v es el peso total de la carcasa sin considerar accesorios internos, C_w es un factor con valor 1,15 para recipientes con numerosos accesorios internos (como es el caso), L_t es la longitud

de la sección cilíndrica (que posee el mismo valor que la longitud de los tubos del reactor), g es la aceleración de la gravedad, t es el espesor de la pared, ρ_{ss} es la densidad del material que conforma el recipiente y D_m es el diámetro medio del recipiente que se calcula adicionando el espesor de la carcasa a su diámetro interno.

Los valores de los parámetros considerados para el cálculo, así como el resultado obtenido, se encuentran recogidos en la Tabla 43.

Tabla 43. Peso muerto del recipiente

Parámetro	Valor
C_w	1,15
$\rho_{ss}, kg/m^3$	8000
D_m, m	2,05
$g, m/s^2$	9,81
H_v, m	7,32
$t_{carcasa}, mm$	9
W_v, kN	46,84

Asimismo, resulta necesario el cálculo del volumen que ocupan los tubos en el interior del reactor para poder conocer la carga que estos ejercen. Para ello, en primer lugar, se determina el volumen de la corona circular de cada uno de los tubos con la Ecuación 71.

$$V_{cc} = \left(\frac{D_{ot}^2 - D_{it}^2}{4} \right) \cdot \pi \cdot L_t \quad \text{Ecuación 71}$$

Así, es posible obtener el volumen ocupado por todos los tubos (V_t), realizando el producto del número total de tubos (n_t) por el volumen de la corona (V_{cc}) calculado.

Determinado el volumen ocupado por el conjunto de tubos, conociendo la aceleración de la gravedad (g) y la densidad del acero inoxidable AISI 304 (ρ_{ss}), se procede al cálculo de la carga ejercida por el peso de los tubos (W_t) empleando la Ecuación 72.

$$W_t = V_t \cdot \rho_{ss} \cdot g \quad \text{Ecuación 72}$$

Los tubos, a parte de su propio peso, están rellenos de partículas de catalizador. Es necesario calcular el peso de estas (W_c) haciendo uso de la Ecuación 73.

$$W_{cat} = m_{cat} \cdot g \quad \text{Ecuación 73}$$

Los valores empleados en los cálculos y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 44.

Tabla 44. Peso muerto del catalizador y los tubos

Parámetro	Valor
D_{ot}, mm	60
D_{it}, mm	53
n_t	573
L_t	7,32
$\rho_{ss}, kg/m^3$	8000
m_{cat}, kg	6015
V_{cc}, dm^3	4,55
V_t, m^3	2,61
W_t, kN	204,5
W_{cat}, kN	59

Además, debe ser considerado que durante la operación del reactor este se encuentra cargado del agua de enfriamiento que circula por carcasa y de la mezcla reaccionante que se localiza en los tubos. Por tanto, debe calcularse el peso del equipo cuando se encuentre lleno de líquido. Para esto se considera agua como fluido que llena tanto la carcasa como el espacio vacío de los tubos.

El volumen del interior de la carcasa (V_s) puede obtenerse mediante la Ecuación 74. Asimismo, conocida la porosidad del lecho empacado (ε) en el interior de los tubos, mediante la Ecuación 75 se obtiene el volumen ocupado por el catalizador.

$$V_s = \pi \cdot \frac{D_{is}^2}{4} \cdot L_t \quad \text{Ecuación 74}$$

$$V_{cat} = \pi \cdot \left(\frac{D_{it}^2}{4} \right) \cdot (1 - \varepsilon) \cdot L_t \cdot n_t \quad \text{Ecuación 75}$$

Conociendo el volumen total que reside en el interior de la carcasa y restándole el valor del volumen ocupado por los tubos y el catalizador se determina el volumen libre para el líquido. Este cálculo es posible realizarlo siguiendo la Ecuación 76.

$$V_{liq} = V_s - V_t - V_{cat} \quad \text{Ecuación 76}$$

Considerando la densidad del agua y la aceleración por gravedad, con la Ecuación 77 se obtiene la carga correspondiente al líquido que circulará por el interior del reactor R-101.

$$W_{liq} = V_{liq} \cdot \rho_{agua} \cdot g \quad \text{Ecuación 77}$$

Los valores con los que se realizaron los cálculos, así como los resultados finales, se presentan en la Tabla 45.

Tabla 45. Peso muerto del líquido en el interior del recipiente

Parámetro	Valor
D_{is}, m	2,04
D_{it}, mm	53
n_t	573
L_t, m	7,32
ε	0,4
V_t, m^3	2,61
V_s, m^3	23,93
V_{cat}, m^3	5,55
V_{liq}, m^3	15,77
$g, m/s^2$	9,81
$\rho_{agua}, kg/m^3$	1000
W_{liq}, kN	154,66

Por último, en la Tabla 46 se muestra la carga total a la que está sometido el reactor R-101 cuando se encuentra vacío y repleto de líquido. La carga total, cuando el equipo se encuentra vacío, es calculada como la suma del peso del catalizador, el del recipiente y el de todos los tubos internos. Adicionando el peso del líquido, se obtiene la carga cuando el reactor está lleno.

Tabla 46. Carga total por peso muerto del reactor R-101

Carga total	Vacío	Lleno
W, kN	310,35	465,04

12.5.2. Otras cargas

A mayores del peso muerto existen otros tipos de cargas que originan tensiones en el recipiente y deben tenerse en consideración.

Resulta relevante conocer la carga debida al material aislante alrededor de la carcasa. Sin embargo, para el reactor R-101 esta carga no se tendrá en cuenta, pues no resulta necesario el empleo de material aislante dado que la temperatura de diseño para el lado de la carcasa es 42°C. Esta temperatura no supone peligro alguno para los operarios de la planta. Otro posible motivo para la implantación del aislante en el exterior de la carcasa es prevenir la transmisión del calor procedente del ambiente. Para el presente caso, el calentamiento del agua refrigerada debido al aporte energético del medio externo se considera insignificante comparado con el liberado por la reacción en el interior de los tubos y, por tanto, la instalación de un aislante no aportaría beneficio alguno.

Asimismo, tampoco se consideran las cargas por viento. Estas deben tenerse en cuenta cuando se realiza el diseño para recipientes con una altura considerable y que se encuentran en posición vertical en el exterior. En el apartado 12.7. *Selección del soporte* se opta por una orientación horizontal del recipiente. Por este motivo no se consideran cargas debidas al viento.

Por último, al no encontrarse ubicada la planta química en una zona considerada de riesgo sísmico, las posibles cargas que puedan surgir como consecuencia de un terremoto se desprecian.

12.6. Análisis de tensiones

En un recipiente cilíndrico surge un esfuerzo radial y otro longitudinal debidos a la presión. Estos son calculados con las expresiones de la Ecuación 78 y la Ecuación 79 respectivamente, haciendo uso de las presiones de diseño, diámetros internos y espesores correspondientes al lado de carcasa y tubos.

$$\sigma_{radial} = \frac{P \cdot D_i}{2 \cdot t} \quad \text{Ecuación 78}$$

$$\sigma_{longitudinal} = \frac{P \cdot D_i}{4 \cdot t} \quad \text{Ecuación 79}$$

Ambos esfuerzos aparecen en la carcasa y en los tubos y sus valores se muestran en la Tabla 47.

Tabla 47. Esfuerzos radial y longitudinal en carcasa y tubos

	Tubos	Carcasa
$\sigma_{radial}, N/mm^2$	22,48	42,65
$\sigma_{longitudinal}, N/mm^2$	11,24	21,32

De igual forma, es generado un esfuerzo que tiene como origen el peso muerto del recipiente, su contenido interno y cualquier elemento adjunto y se calcula empleando la Ecuación 80. El valor obtenido tiene signo negativo, pues para puntos por encima del plano del soporte este esfuerzo es de tipo compresivo.

$$\sigma_{peso\ muerto} = \frac{-W_{vacío}}{\pi \cdot (D_i + t) \cdot t} \quad \text{Ecuación 80}$$

En la Tabla 48 se muestran los parámetros empleados para el cálculo de dicho esfuerzo y el resultado final obtenido.

Tabla 48. Cálculos del esfuerzo debido al peso muerto del recipiente

Parámetro	Valor
$W_{vacío}, kN$	310,35
D_{is}, m	2,04
t_s, mm	9
$\sigma_{peso\ muerto}, N/mm^2$	- 5,36

12.7. Selección del soporte

La estructura empleada a la hora de dar soporte a un recipiente depende en su tamaño, su forma y su peso. También resulta relevante conocer su temperatura y presión de diseño, así como su

posición: horizontal o vertical. Comúnmente se emplean soportes tipo silla de montar para recipientes con orientación horizontal y tipo falda para los verticales con una altura considerable.

El soporte debe poder aguantar el peso del recipiente, de su contenido y de cualquier otro tipo de carga que pueda surgir. Además, el propio soporte añade cargas localizadas en la pared del recipiente y debe asegurarse que la tensión generada sea menor a la máxima permitida.

Para decidir la orientación deseada del reactor se consultan las heurísticas. En ellas se recomienda la posición horizontal para recipientes con un volumen comprendido en el intervalo de 4 a 40 m³ y con una relación entre longitud y radio (L/D) en el rango de 2 a 5. En la Tabla 49 se muestran los parámetros de interés calculados para el recipiente en cuestión.

Así, es posible observar cómo tanto el volumen del recipiente como la relación L/D se encuentran dentro de los límites establecidos para recipientes horizontales.

Tabla 49. Elección de la orientación del reactor R-101

Parámetro	Valor
D_{os}, m	2,06
L_t, m	7,32
L/D	3,6
$V_{recipiente}, m^3$	24,4

Asimismo, esta posición proporciona una mayor capacidad de líquido, mejor control de la turbulencia y su mantenimiento resulta más sencillo. Sin embargo, como principal hándicap cabe destacar que el área ocupada será superior a la necesaria para la orientación vertical. Puesto que existe disponibilidad de espacio en la parcela seleccionada para la ubicación de la planta, el área ocupada no presenta un problema y se opta por la selección de la posición horizontal.

Como anteriormente se mencionó, el soporte tipo silla de montar es el más comúnmente empleado para recipientes cilíndricos horizontales. Por esta razón, resulta el seleccionado y se procede a su dimensionado.

Este tipo de soporte se compone de dos sillas sobre las que se asienta el recipiente. El recipiente, sujeto por ambas sillas, puede ser considerado como una viga simple con dos soportes, una carga uniforme y una distribución del momento flector como el mostrado en la Figura 22. Se alcanzan valores máximos donde están situados los soportes y en el punto medio.

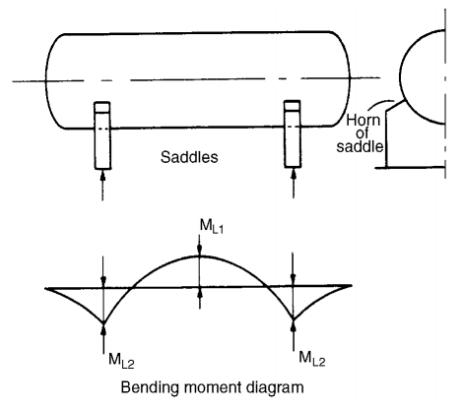
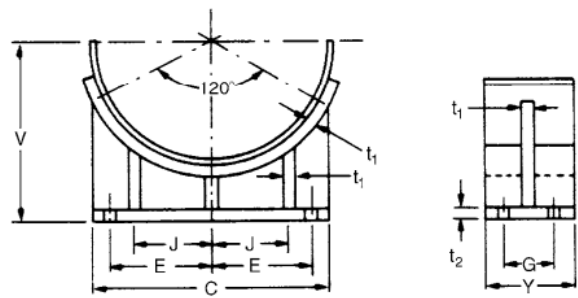


Figura 22. Recipiente cilíndrico en posición horizontal con soportes de tipo silla de montar. Fuente: (1)

La posición óptima de los soportes para obtener el menor momento flector máximo posible se localiza en el punto donde se consigue que ese máximo en el punto medio sea igual en magnitud al máximo alcanzado en los soportes. Para una viga con cargas uniformemente distribuidas, esta posición está situada a un 21% de la longitud de la viga desde cada uno de los extremos del recipiente.

A la hora de diseñar estos soportes debe cuidarse que el ángulo de contacto no sea inferior a 120° y no supere los 150°. Normalmente se emplean placas de protección soldadas a la carcasa para reforzar la pared del recipiente sobre el área de contacto con el soporte. En la Figura 23 se muestran tabuladas las dimensiones estándar para soportes tipo silla hechos de acero.



Vessel diam. (m)	Maximum weight (kN)	Dimensions (m)						mm			
		V	Y	C	E	J	G	t ₂	t ₁	Bolt diam.	Bolt holes
1.4	230	0.88	0.20	1.24	0.53	0.305	0.140	12	10	24	30
1.6	330	0.98	0.20	1.41	0.62	0.350	0.140	12	10	24	30
1.8	380	1.08	0.20	1.59	0.71	0.405	0.140	12	10	24	30
2.0	460	1.18	0.20	1.77	0.80	0.450	0.140	12	10	24	30
2.2	750	1.28	0.225	1.95	0.89	0.520	0.150	16	12	24	30
2.4	900	1.38	0.225	2.13	0.98	0.565	0.150	16	12	27	33
2.6	1000	1.48	0.225	2.30	1.03	0.590	0.150	16	12	27	33
2.8	1350	1.58	0.25	2.50	1.10	0.625	0.150	16	12	27	33
3.0	1750	1.68	0.25	2.64	1.18	0.665	0.150	16	12	27	33
3.2	2000	1.78	0.25	2.82	1.26	0.730	0.150	16	12	27	33
3.6	2500	1.98	0.25	3.20	1.40	0.815	0.150	16	12	27	33

All contacting edges fillet welded

Figura 23. Dimensiones estandarizadas del soporte tipo silla. Fuente: (1)

Conocido el valor del diámetro externo de carcasa, así como la carga total del reactor R-101, empleando la Figura 23 se determina que para un diámetro de carcasa aproximado a 2,2 m el soporte tipo silla permite una carga máxima de 750 kN. Como este valor es superior a la carga del reactor lleno calculada anteriormente (la cual resultó de 465,04 kN), se valida la utilización de estos soportes. Acto seguido, de la misma tabla se obtienen los valores estandarizados para el dimensionamiento y que serán utilizados en la elaboración del plano del diseño mecánico correspondiente al equipo en cuestión en el *Documento II. Planos*.

12.8. Tubuladuras, conexiones y compensación de aperturas

Todos los recipientes de proceso tienen aperturas para conexiones, bocas de hombre y accesorios. El reactor R-101 consta de cuatro tubuladuras para la entrada y salida de los respectivos fluidos que circulan por la carcasa y los tubos. Asimismo, presentará el número de boquillas pertinentes para el correcto control del equipo, incluyendo una para la válvula de alivio PSV-103, que será dimensionada más adelante.

Además, la presencia de una apertura debilita la carcasa y aumenta la concentración de tensiones. Esta tensión generada en los bordes del agujero es considerablemente superior a la del resto de la carcasa. Para compensar el efecto de estas aperturas, se aumenta el espesor de la pared en la región adyacente. En la Figura 24 se muestran disposiciones típicas de este refuerzo.

El método más sencillo de proporcionar dicha compensación es soldar una almohadilla o collarín alrededor de la apertura (esquema a) de la Figura 24). El diámetro exterior de ese collarín es normalmente el doble del diámetro del agujero.

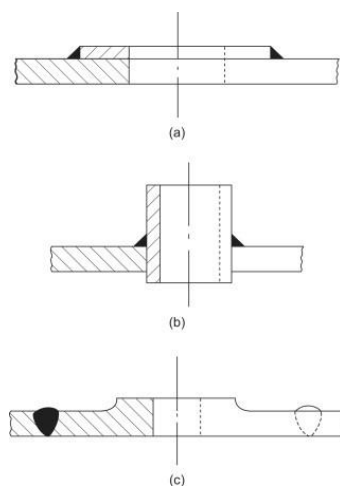


Figura 24. Tipos de compensación para aperturas: a) Almohadilla soldada b) Boquilla insertada c) Anillo forjado. Fuente: (1)

En el plano del diseño mecánico del presente equipo pueden apreciarse en detalle dichas conexiones, así como su correspondiente compensación.

13. Válvula de alivio PSV-103

13.1. Introducción

Una válvula de alivio, comúnmente denominada PSV (por sus siglas en inglés, *Pressure Safety Valve*) es un dispositivo diseñado para proteger recipientes o sistemas que trabajan a presión en caso de suceder cualquier evento causante de una sobrepresión en su interior, es decir, un incremento de la presión por encima del valor de diseño o de la máxima presión de trabajo permitida. La válvula de alivio se abrirá a una presión predeterminada establecida y procederá a su cierre cuando la presión del sistema retorne a valores seguros.

Puesto que el reactor R-101 trabaja a presión (28 bar) y existe la posibilidad de que tenga lugar un evento de sobrepresión indeseado en su interior, se le instalará la válvula de alivio PSV-103 para, en caso de ser necesario, drenar el equipo. Debido a que se trata de un dispositivo de seguridad, existen numerosos códigos y estándares para su diseño y aplicación. A continuación, se procederá al diseño y posterior selección de la válvula de alivio del reactor siguiendo el Estándar *API 520 Sizing, Selection, and Installation of Pressure-relieving Devices in Refineries Part I* y de acuerdo con el Código ASME, Sección VIII.

13.2. Dimensionamiento de la válvula

Para el dimensionamiento de válvulas de alivio con servicio para líquidos y con certificado de capacidad, de acuerdo con el Código ASME, se emplea la expresión recogida en la Ecuación 81.

$$A = \frac{11,78 \cdot Q}{K_d \cdot K_w \cdot K_c \cdot K_v} \sqrt{\frac{G_l}{P_1 - P_2}} \quad \text{Ecuación 81}$$

Siendo A el área requerida de descarga en mm^2 , Q el caudal de fluido drenado a través de la válvula en L/min, K_d es el coeficiente de descarga, K_w es el factor de corrección debido a la contrapresión, K_c es un factor de corrección relacionado con la combinación de la PSV con un disco de ruptura, K_v es el factor de corrección debido a la viscosidad, G_l es la gravedad específica del líquido referida al agua en condiciones estándar, P_1 es la presión de alivio, también denominada de tarado y, P_2 hace referencia a la contrapresión manométrica, estos dos últimos términos se introducen en la ecuación en kPag.

Siguiendo el Código API, la presión de tarado, es decir, la presión manométrica a la que la válvula procede a su apertura es calculada como la presión de diseño del equipo corregida por un factor de sobrepresión de 1,1. Asimismo, P_2 se corresponde con la presión atmosférica.

El coeficiente de descarga debe ser proporcionado por el fabricante, aunque para un dimensionado preliminar suele asumirse como valor 0,65. Respecto al factor de corrección de contrapresión, esta toma como valor la unidad cuando la contrapresión es atmosférica, como resulta el caso. Puesto que no se opta por la instalación de un disco de ruptura, K_c es 1. Para el caso del factor de

corrección por viscosidad, se asume para una primera estimación del área de descarga que K_v tiene como valor la unidad. Este coeficiente adopta valores inferiores a la unidad en caso de trabajar con fluidos viscosos. Por consiguiente, para determinar que el valor del coeficiente asumido en el cálculo preliminar del área es correcto, debe obtenerse el número Reynold del fluido a través del orificio empleando la Ecuación 82.

$$Re = \frac{18800 \cdot G_l \cdot Q}{\mu \cdot \sqrt{A}} \quad \text{Ecuación 82}$$

Correspondiéndose μ con la viscosidad media de la mezcla reaccionante que circula por el interior del reactor en centipoise. Posteriormente, mediante la Ecuación 83 se obtiene el nuevo valor de dicho coeficiente, a continuación, se comprueba su adecuación con el asumido inicialmente y, de ser necesario, se emplea para recalcular el área de descarga.

$$K_v = \left(0,9935 + \frac{2,878}{Re^{0,5}} + \frac{342,75}{Re^{1,5}} \right)^{-1} \quad \text{Ecuación 83}$$

Los valores asumidos para el cálculo del área, así como el resultado obtenido, se presentan en la Tabla 50.

Tabla 50. Dimensionamiento de la PSV-103

Parámetro	Valor
$Q, L/min$	4887,33
G_l	0,775
$P_{\text{diseño tubos}}, bar$	29,7
P_1, kPa_g	3267
P_2, kPa_g	101,33
K_d	0,65
K_w	1
K_c	1
K_v	1
A, mm^2	1385,87

Es ahora de interés determinar el Reynolds del líquido a través del orificio para calcular K_v . Los parámetros empleados, así como el resultado final se recogen en la Tabla 51.

Tabla 51. Dimensionamiento de la PSV-103

Parámetro	Valor
$Q, L/min$	4887,33
G_l	0,775
μ_{mezcla}, cp	$1,56 \cdot 10^{-2}$
Re	$1,23 \cdot 10^8$
K_v	1

Como cabía esperar, el factor de corrección por viscosidad obtenido no varía con respecto al supuesto inicialmente puesto que se trabaja con un fluido poco viscoso. Por consiguiente, se asume correcta el área efectiva de descarga de la válvula calculada inicialmente.

Por último, debe estandarizarse el área dado que no existen válvulas de alivio de todas las dimensiones. Para ello se seleccionará aquella válvula de dimensiones estándar cuya área sea inmediatamente superior al valor calculado. Tras acudir al catálogo de válvulas de alivio Crosby (28), de la compañía Emerson, se escoge el orificio designado como “L”, el cual proporciona un área estándar de 2853 in² (1841 mm²). Siendo el estilo JLT-JOS/JBS óptimo cuando se trabaja con líquido para dicha área estandarizada.

14. Bibliografía

1. **SINNOTT, Ray y Gavin TOWLER.** *Chemical Engineering Design*. 5ª ed. Burlington : Elsevier, 2009. ISBN: 978-0-7506-8551-1.
2. **RUSSO, V. et al.** *Chemical and Technical Aspects of Propene Oxide Production via Hydrogen Peroxide (HPPO Process)*. [En línea] 2013. [Citado el: 2 de abril de 2020.] Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ie3023862>.
3. **FOGLER, Scott H.** *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. 4ª ed. Naucalpan de Juárez : PEARSON Prentice Hall, 2008. ISBN: 978-970-26-1198-1.
4. **SEIDER, Warren D. et al.** *Product and Process Design Principles*. Tercera. Danvers : John Wiley & Sons, Inc., 2009. ISBN: 978-0470-04895-5.
5. **HAAS, Thomas, Willi et al.** *Patent n°: US 6,600,055 B2*. [En línea] Degussa AG; Unde GmbH, 13 de junio de 2002. [Citado el: 28 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://patents.google.com/patent/US6600055B2/en>.
6. **Eni. Polimeri Europa.** *Titanium Silicalite (TS-1)*. [En línea] [Citado el: 20 de abril de 2020.] Disponible en: https://www.versalis.eni.com/irj/portal/anonymous?guest_user=anon_en&NavigationTarget=R OLES://portal_content/z_eni_ve_fl_versalis/z_eni_ve_fl_roles/z_eni_ve_rl_gues_versalis/LaNo straOfferta/shortcut/Licensing/Catalizzatori.
7. **TURTON, Richard. et al.** *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes*. Cuarta. Michigan : Prentice Hall, 2012. págs. 323-339. ISBN: 978-0-13-261812-0.
8. **JENTOFT, Friederike C.** *Advances in Catalysis*. Oklahoma : Elsevier, 2014. pág. 64. Vol. 57. ISBN: 978-0-12-800175-1.

9. **SCHMIDT, Franz et al.** *HPPO Process Technology: A novel route to propylene oxide*. [En línea] marzo de 2014. [Citado el: 15 de abril de 2020.] Disponible en: https://www.teknoscienze.com/Contents/Riviste/PDF/chimica_2_2014_RGB_33-37.pdf.
10. **SULIMOV, A., S. DANOV y A. OVCHAROVA.** *Kinetics of Propylene Epoxidation with Hydrogen Peroxide Catalyzed by Extruded Titanium Silicalite in Methanol*. [En línea] 26 de noviembre de 2015. Disponible en: <https://link.springer.com/content/pdf/10.1134/S0023158416040121.pdf>.
11. **ULLMANN, Fritz.** *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Séptima. Nueva York : Wiley-VCH, 2011. ISBN: 978-3-527-32943-4.
12. **LIN, Min et al.** *Green and efficient epoxidation of propylene oxide with hydrogen peroxide (HPPO process) catalyzed by hollow TS-1 zeolite: A 1.0 kt/a pilot-scale study*. [En línea] 2016. [Citado el: 2020 de abril de 12.] Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1385894716301735>.
13. **OVCHAROV, A., S. DANOV. y A. SULIMOV.** *Investigation of the Kinetic and the Development of a Mathematical Model for the Synthesis of Propylene Oxide in Methanol Environment*. [En línea] 2012. [Citado el: 31 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://www.sibran.ru/upload/iblock/32f/32f67ebdc6420e7c9a82214a0d739d7d.pdf>.
14. **PERRY H., Robert.** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. Nueva York : McGraw-Hill, 1997. ISBN: 0-07-049841-5.
15. **Tubular Exchanger Manufacturers Association, Inc.** *TEMA Standards*. [En línea] [Citado el: 20 de de abril de 2020.] Disponible en: tema.org.
16. **LÓPEZ CABANES, Antonio y Antonio BODALO SANTOYO.** *Simulación de un reactor-cambiador: Parte I*. [En línea] Universidad de Murcia. [Citado el: 19 de marzo de 2020.] Disponible en: <https://digitum.um.es/digitum/bitstream/10201/4997/1/Simulaci%C3%B3n%20de%20un%20reactor-cambiador.%20Parte%20I.pdf>.
17. **RHODES, Martin J.** *Introduction to particle technology*. Chichester : John Wiley & Sons, 2008. págs. 153-156. ISBN: 9780470014271.
18. **NEMS, Magdalena et al.** *Thermo-Hydraulic Analysis of Heat Storage Filled with the Ceramic Bricks Dedicated to the Solar Air Heating System*. [En línea] 12 de agosto de 2017. [Citado el: 23 de abril de 2020.] Disponible en: <https://www.mdpi.com/1996-1944/10/8/940>.
19. **INCROPERA, Frank P.** *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Sexta. Danvers : John Wiley & Sons, 2005. ISBN: 978-0-471-45728-2.

20. **CAO, Eduardo.** *Heat Transfer in Process Engineering.* Buenos Aires : McGraw-Hill Education, 2010. ISBN: 9780071624084.
21. **ASHBY, Michael F.** *Materials Selection in Mechanical Design.* Tercera. Oxford : Elsevier, 2005. ISBN: 0 7506 6168 2.
22. **OKAFOR, Christian E. et al.** *Material Selection and Fluid Flow Analysis of Parallel Flow Heat Exchangers.* [En línea] enero de 2017. [Citado el: 28 de abril de 2020.] Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/313086697_Material_Selection_and_Fluid_Flow_Analysis_of_Parallel_Flow_Heat_Exchanger. ISSN: 2454-7077.
23. **PLANES.** *Tipos de acero inoxidable en el mecanizado: los más usados.* [En línea] diciembre de 2018. [Citado el: 12 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://ferrosplanes.com/tipos-de-acero-inoxidable-en-el-mecanizado-los-mas-usados/>.
24. **GRACO.** *Chemical Compatibility Guide.* [En línea] 7 de febrero de 2013. [Citado el: 27 de abril de 2020.] Disponible en: https://www.graco.com/content/dam/graco/ipd/literature/misc/chemical-compatibility-guide/Graco_ChemCompGuideEN-B.pdf.
25. **WALAS, Stanley M.** *Chemical Process Equipment. Selection and Design.* Massachusetts : Butterworths Series in Chemical Engineering, 1990. ISBN: 0-7506-9385-1.
26. **TEXHOKOM.** *Heads: DIN- ASME- Standardas.* [En línea] [Citado el: 29 de abril de 2020.] Disponible en: http://www.trubotvod.ru/e-store/element/standarts/DIN_28013.pdf.
27. **Slawinski.** *World of Heads. Ellipsoidal Head according to DIN 28013.* [En línea] [Citado el: 29 de abril de 2020.] Disponible en: <https://www.slawinski.co.uk/products/ellipsoidal-heads/>.
28. **CROSBY.** *Crosby® Pressure Relief Valve Engineering Handbook.* [En línea] Mayo de 1997. [Citado el: 6 de junio de 2020.] Disponible en: <https://www.isibang.ac.in/~library/onlinerz/resources/enghandbook3.pdf>.
29. **Fastwell.** *Stainless Steel Price.* [En línea] [Citado el: 27 de abril de 2020.] Disponible en: <https://www.fastwell.in/stainless-steel.html>.
30. **RUSSO, V. et al.** I&EC research. *Chemical and Technical Aspects of Propene Oxide Production via Hydrogen Peroxide (HPPO Process).* [En línea] 2013. [Citado el: 2 de marzo de 2020.] <https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/ie3023862>.

PARTE II

Columna de destilación T-304

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	3
2. DISEÑO DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN	4
2.1. Especificación de la corriente de alimentación.....	4
2.2. Especificación de las corrientes de cabezas y colas.....	5
2.3. Selección de las condiciones de operación	6
2.3.1. Presión de la columna.....	6
2.3.2. Equilibrio líquido-vapor	6
2.3.3. Temperaturas de burbuja y de rocío	13
2.3.4. Modo de operación	13
2.4. Tipo de dispositivo de contacto	14
2.5. Número de etapas de equilibrio	14
2.5.1. Diseño simplificado de la columna	15
2.5.2. Diseño riguroso de la columna	20
2.5.3. Eficiencia de la columna y número de etapas reales	34
2.6. Diseño hidráulico	36
2.6.1. Espaciado entre platos	36
2.6.2. Selección del tipo de plato.....	36
2.6.3. Rango de operación	37
2.6.4. Caudales	37
2.6.5. Propiedades físicas del sistema	37
2.6.6. Diámetro de la columna.....	39
2.6.7. Verificación del arrastre	41
2.6.8. Selección del patrón de flujo	42
2.6.9. Estructura del plato.....	42
2.6.10. Comprobación de la velocidad de goteo	43
2.6.11. Caída de presión.....	45
2.6.12. Verificación del retorno de la bajante	46

2.6.13.	Comprobación del tiempo de residencia	48
2.6.14.	Detalles del plato.....	48
2.7.	Selección del material de construcción.....	50
2.8.	Diseño mecánico.....	53
2.8.1.	Temperatura de diseño	54
2.8.2.	Presión de diseño.....	54
2.8.3.	Máximo esfuerzo permisible	54
2.8.4.	Espesor mínimo de carcasa	55
2.8.5.	Cabezales de la columna	56
2.8.6.	Altura de la columna	57
2.8.7.	Aislante.....	58
2.8.8.	Análisis de tensiones	61
2.8.9.	Boquillas.....	65
2.8.10.	Soporte de la columna.....	65
3.	DISEÑO DE LA VÁLVULA DE ALIVIO	67
4.	BIBLIOGRAFÍA.....	69

1. INTRODUCCIÓN

La separación de una mezcla homogénea en sus componentes individuales es una etapa fundamental en muchos procesos industriales. De los diversos métodos que pueden ser utilizados para llevar a cabo la separación, la destilación es el más importante empleado a nivel comercial, representando más de un 90% de las separaciones.

El objetivo general de la destilación es la separación de compuestos que tienen distintas presiones de vapor a una temperatura dada. El principio en el que se basa esta técnica es simple. Se crea un contacto íntimo entre la mezcla inicial y una segunda fase, con la finalidad de promover la transferencia de materia entre estas dos fases. Tres etapas están involucradas en este proceso: la creación de un sistema bifásico, la transferencia de masa entre fases y la separación de las fases. Numerosos métodos de separación están basados en este mismo principio, sin embargo, lo que destaca a la destilación con respecto a otros es que la segunda fase es generada por evaporación parcial del líquido inicial, por lo que no es requerido el uso de un componente externo para llevar a cabo la separación, lo cual evita costosas regeneraciones y separaciones posteriores.

El proceso de destilación está gobernado por el equilibrio termodinámico. El vapor y el líquido son sometidos a un contacto íntimo en un flujo en contracorriente, subiendo el vapor hasta la parte superior de la columna mientras que el líquido fluye hacia abajo. La transferencia de materia entre ambas fases ocurre al no encontrarse en equilibrio inicialmente. El arte de esta técnica se basa en determinar qué tanto se puede aproximar el proceso a conseguir el equilibrio en cada etapa (1).

La separación depende de la diferencia de volatilidades entre los componentes. Cuanto mayor sea la volatilidad relativa, más fácil será la separación. El equipo básico requerido para una destilación en régimen continuo se presenta en la Figura 1. Parte del líquido de salida del condensador es retornado a la columna para proveer una corriente líquida por encima de la etapa de alimentación, este es usualmente denominado reflujo. Por otro lado, parte del líquido extraído de la base es vaporizado en la caldera y reincorporado para conseguir un flujo de vapor en la columna.

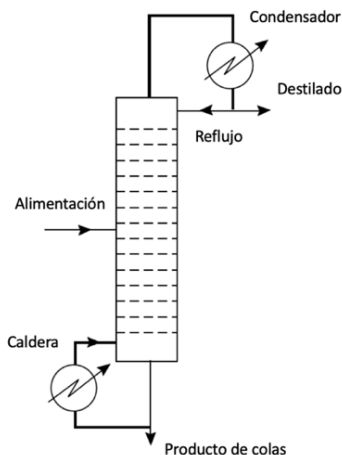


Figura 1. Partes básicas de una columna de destilación. Fuente: (2)

En la sección inferior al punto de alimentación los componentes más volátiles son retirados del líquido, y esta es comúnmente denominada *sección de agotamiento*. Contrariamente, a medida que se asciende por las etapas superiores a la de alimentación, la concentración de los más volátiles va en incremento, por lo que se suele llamar *sector de enriquecimiento* (2).

2. DISEÑO DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN

El procedimiento de diseño de una columna de destilación es fundamental para un amplio número de industrias, y, en específico, para el presente proyecto, al ser necesaria la separación adecuada de los componentes para conseguir una especificación del producto, su recirculación al proceso o su desecho, según sea el caso. El proceso de diseño puede ser dividido en los siguientes pasos (2):

1. Especificación del grado de separación requerido.
2. Selección de las condiciones de operación: por lotes o continua, presión de operación.
3. Selección del tipo de dispositivo de contacto: columna de platos o empacada.
4. Determinación de los requerimientos de etapas y reflujo: número de etapas de equilibrio.
5. Dimensionamiento de la columna: diámetro, número real de etapas.
6. Diseño de los accesorios internos de la columna: platos, bajantes.
7. Diseño mecánico: recipiente, soporte.

2.1. Especificación de la corriente de alimentación

Como fue posible observar en el balance de materia, la alimentación a la columna T-304 está compuesta por tres sustancias: metanol, agua y propilenglicol. Esta corriente es un líquido saturado que ingresa a la torre a su temperatura de burbuja, específicamente 68,34 °C, a una presión igual a la atmosférica (101325 Pa), presión a la que, además, operará la columna. Este valor será revisado una vez calculada la caída de presión en la columna. A continuación, en la Tabla 1 se presentan los flujos molares individuales y las fracciones molares de cada componente, así como el caudal total de la corriente.

Tabla 1. Especificaciones de la corriente de alimentación a la columna T-304

Componente	Flujo molar, <i>kmol/h</i>	Fracción molar (<i>z_i</i>)
Metanol	2484,84	0,76067
Agua	780,58	0,23895
Propilenglicol	1,23	0,00038
Total	3266,64	1

Resulta evidente que se encuentran solo trazas del propilenglicol en la corriente de alimentación, pues está presente en una proporción notablemente inferior a la de los otros dos componentes, representando solamente un 0,038% de los moles totales. Por lo tanto, es considerado una impureza en la corriente. Gracias a lo establecido anteriormente, sumado al hecho de que es el

componente más pesado de los tres, se estimará que todo el propilenglicol introducido a la columna será separado por la corriente de colas de esta. Es por esto por lo que no será tomado en cuenta al momento de llevar a cabo los cálculos relacionados con la columna de destilación en cuestión. De esta manera, los flujos de la alimentación se toman de la siguiente forma:

Tabla 2. Especificaciones simplificadas de la corriente de alimentación a la columna T-304

Componente	Flujo molar, <i>kmol/h</i>	Fracción molar (<i>z_f</i>)
Metanol	2484,84	0,761
Agua	780,58	0,239
Total	3265,41	1

2.2. Especificación de las corrientes de cabezas y colas

A continuación, serán expresadas las consideraciones efectuadas para conseguir la separación requerida en el proceso. Es importante destacar que estas serán las que definan las condiciones de temperatura y presión de la columna y de las corrientes de salida, así como el número de etapas de la columna y demás parámetros de diseño.

El propósito fundamental de esta columna de destilación es el de separar el metanol empleado en la etapa de reacción como disolvente para su recirculación al inicio del proceso. De esta forma, se vuelve necesario establecer una recuperación casi completa del mismo, con el objetivo de reducir gastos de reposición del compuesto. La separación deseada consistirá en una recuperación alta de metanol por cabezas, precisamente de un 99,94% del total de entrada.

Por otro lado, el agua que acompaña al metanol en la alimentación al equipo será destinada, acto posterior a su separación, a un procedimiento de tratamiento de aguas residuales, pues esta no posee utilidad alguna en el proceso en cuestión, ni valor económico como subproducto. Sin embargo, la recirculación de una pequeña parte del agua no representaría un inconveniente notable para el proceso, al ser también alimentada junto con otros componentes de entrada, como el peróxido de hidrógeno y el mismo metanol.

Así, será permitida en el destilado una fracción de 3,21% del total de agua alimentada, con la finalidad de alcanzar una composición considerable en la salida por cabezas y facilitar el proceso de destilación. Esto reducirá el número de etapas de equilibrio necesarias en la torre, puesto que, a mayor pureza exigida de un componente, más complicada se torna la separación.

De esta forma, las corrientes de cabezas y colas serán especificadas según las ecuaciones 1 y 2.

$$D x_d = F z_f \cdot \%_{recup,i} \quad \text{Ecuación 1}$$

$$B x_b = F z_f - D x_d \quad \text{Ecuación 2}$$

Donde D hace referencia al caudal total de la corriente de destilado (kmol/h), x_d a la composición molar del componente i en el destilado, F al flujo de alimentación (kmol/h), z_f a la fracción molar del componente i en la alimentación, $\%_{recup,i}$ a la fracción de recuperación del componente i en el destilado con respecto a lo alimentado a la columna, B al caudal de la corriente de colas (kmol/h) y x_b a la composición molar del componente i en el producto de colas. En la Tabla 3 se reflejan los resultados de los caudales molares de las corrientes de cabezas y colas, así como las fracciones molares correspondientes.

Tabla 3. Especificaciones de corrientes de cabezas y colas

Componente	Cabezas		Colas	
	Flujo molar (D), kmol/h	Fracción molar (x_d)	Flujo molar (B), kmol/h	Fracción molar (x_b)
Metanol	2483,22	0,990	1,61	0,002
Agua	25,08	0,010	755,49	0,998
Total	2508,31	1	757,10	1

2.3. Selección de las condiciones de operación

2.3.1. Presión de la columna

Exceptuando el caso en el que son destilados materiales sensibles a altas temperaturas, la principal consideración al seleccionar la presión de operación de la columna suele ser la de asegurar que la temperatura de rocío del destilado pueda ser conseguida fácilmente con las utilidades de enfriamiento disponibles en la planta. La temperatura máxima del agua de refrigeración en verano es considerada como 30 °C (2).

La menor temperatura posible presente en la columna es la de vaporización del componente más volátil. En este caso se trata del metanol, cuyo punto de ebullición es de 64,5 °C en condiciones atmosféricas. Por lo tanto, se comprueba que existirá suficiente diferencia de temperatura en el condensador como para producirse una adecuada transferencia de calor entre fluidos. De esta manera, la presión a la que operará la torre será de 101325 Pa, es decir, a presión atmosférica.

2.3.2. Equilibrio líquido-vapor

La mezcla entre el metanol y el agua es bien conocida y ha sido estudiada desde hace décadas por numerosos científicos. De esta manera, se torna una tarea sencilla encontrar datos experimentales del equilibrio líquido-vapor de este sistema a presión atmosférica. A continuación, en la Tabla 4 se presentan los valores recogidos de la bibliografía (3) de las fracciones molares de metanol en el vapor y el líquido, a temperaturas entre la de ebullición del metanol y la del agua, donde x representa la fracción molar del metanol en fase líquida e y su fracción molar en fase vapor.

Tabla 4. Datos bibliográficos del equilibrio líquido-vapor del sistema agua-metanol a presión atmosférica.
Fuente: (3)

Temperatura, °C	x	y
64,5	1,000	1,000
65,0	0,950	0,979
66,0	0,900	0,958
67,6	0,800	0,915
69,3	0,700	0,870
71,2	0,600	0,825
73,1	0,500	0,779
75,3	0,400	0,729
78,0	0,300	0,665
81,7	0,200	0,579
84,4	0,150	0,517
87,7	0,100	0,418
89,3	0,080	0,365
91,2	0,060	0,304
93,5	0,040	0,230
96,4	0,020	0,134
100,0	0,000	0,000

Con el propósito de llevar a cabo los cálculos requeridos en el diseño de la columna de destilación en cuestión, se vuelve necesario obtener una relación matemática que represente los datos anteriormente exhibidos de manera acertada. Cuando una mezcla de vapor y una disolución líquida coexisten en equilibrio vapor-líquido, la temperatura y la presión son uniformes entre fases. Cabe destacar que, para presiones bajas de alrededor de 1 bar, la fase vapor se supone ideal (el coeficiente de fugacidad es igual a la unidad). No obstante, la mezcla líquida entre los componentes presentes en este sistema se aleja altamente de la idealidad, por lo cual se considera que el uso de un modelo termodinámico de comportamiento de disoluciones reales es la operación adecuada para la gestión de los datos de equilibrio líquido-vapor en este caso. En las próximas secciones será detallado el procedimiento de ajuste de los datos empleando el modelo conocido como la ecuación de Wilson (4).

Ley de Raoult modificada

Como fue adelantado en el apartado anterior, en el equilibrio vapor-líquido, para presiones bajas a moderadas, es posible considerar la fase vapor ideal, conservando el término de desviación de la idealidad solo en la fase líquida. La expresión que relaciona las composiciones de la sustancia i de la mezcla entre ambas fases se presenta en la Ecuación 3. Esta es conocida como la Ley de Raoult modificada, pues es una adaptación de dicha ley, la cual es un modelo más simple que considera ambas fases como ideales (4).

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^o \quad \text{Ecuación 3}$$

Donde P es la presión total a la que se encuentra la disolución, P_i^o la presión de saturación (también llamada presión de vapor) de la especie pura i a la temperatura del sistema y γ_i se denomina coeficiente de actividad de la especie i en disolución. Este último es una propiedad adimensional de las disoluciones que representa la desviación de la idealidad en la fase líquida.

La Ecuación 3 será empleada para los cálculos necesarios en el diseño riguroso de la columna de destilación, mediante la determinación de la temperatura de rocío o la de burbuja, según sea el caso. Se profundizará en esto más adelante. Para ello, se hace necesario conocer dos parámetros presentes en la ecuación, la presión de vapor y el coeficiente de actividad de cada especie a las condiciones a las que se encuentre cada etapa de equilibrio de la columna.

Estimación de la presión de vapor

La presión de vapor de cada componente es estimada empleando la ecuación de Wagner, presentada en la Ecuación 4. (5)

$$\ln \frac{P_i^o}{P_{c,i}} = (1 - \tau)^{-1} [a \tau + b \tau^{1,5} + c \tau^3 + d \tau^6] ; \quad \left[\tau = 1 - \frac{T}{T_{c,i}} \right] \quad \text{Ecuación 4}$$

Donde $P_{c,i}$ representa la presión crítica del componente i (bar), T la temperatura a la que es calculada la presión de vapor (K), $T_{c,i}$ la temperatura crítica del componente (K) y a, b, c, d son las constantes de la ecuación de Wagner, únicas para cada compuesto.

Los valores requeridos para el cálculo de la presión de vapor fueron tomados de la bibliografía (5) y son los plasmados en la Tabla 5. Cabe destacar que la aplicación de esta ecuación es adecuada hasta la temperatura crítica de cada componente. Es posible comprobar que el rango de temperaturas al que operará la columna está contenido dentro del rango de utilidad de esta expresión para ambos compuestos presentes.

Tabla 5. Constantes de la ecuación de Wagner para el cálculo de la presión de vapor. Fuente: (5)

Componente	a	b	c	d	Temperatura crítica, K	Presión crítica, bar
Metanol	-8,54796	0,76982	-3,1085	1,54481	512,6	80,9
Agua	-7,76451	1,45838	-2,7758	-1,23303	647,3	221,2

Teoría termodinámica de disoluciones no ideales

El otro factor fundamental para el cálculo del equilibrio líquido-vapor de la mezcla en cuestión es el coeficiente de actividad de cada especie en la disolución líquida. Para determinarlo han sido desarrollados numerosos modelos y métodos efectivos que permiten ajustar los datos de equilibrio de mezclas no ideales. Previamente a presentar el modelo empleado, se hará en los próximos párrafos un resumen de algunos aspectos importantes de la teoría termodinámica de disoluciones.

Preferentemente, las disoluciones líquidas son tratadas mediante las propiedades que miden sus desviaciones del comportamiento de una disolución ideal. Una propiedad en exceso se define como la diferencia entre el valor real de la propiedad de una disolución y el valor que tendría como disolución ideal a la misma temperatura, presión y composición. Si M representa el valor molar de cualquier propiedad termodinámica extensiva, tal como el volumen y la entalpía, entonces una propiedad en exceso se define como la diferencia entre el valor real de la propiedad y el valor ideal. Esto aplica también en el caso de propiedades parciales. En la Ecuación 5 se presenta la relación anteriormente explicada, donde E hace referencia a la propiedad en exceso e id a la ideal.

$$M^E = M - M^{id} \quad \text{Ecuación 5}$$

La energía de Gibbs en exceso es una propiedad de interés particular. A partir de la relación fundamental de la propiedad en exceso, presentada y deducida en la bibliografía (4) de la cual se obtiene este contenido teórico, se determina que esta se puede escribir del siguiente modo:

$$G_i^E = G_i - G_i^{id} = RT \ln \gamma_i \quad \text{Ecuación 6}$$

Donde G_i es la energía de Gibbs parcial del componente i (J/mol), R la constante de los gases ideales (J/mol K) y T la temperatura a la que se encuentra la mezcla (K).

De la Ecuación 6 es posible deducir que, para una disolución ideal, G_i^E es igual a cero, y, por lo tanto γ_i debe tener un valor de 1. Además, al tratarse de una propiedad parcial, se puede escribir la Ecuación 7 haciendo referencia a la propiedad de la disolución como el sumatorio de las propiedades parciales de todas las especies presentes en la mezcla (4).

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_i x_i \ln \gamma_i \quad \text{Ecuación 7}$$

Ecuación de Wilson

Los desarrollos teóricos modernos del comportamiento de disoluciones líquidas se basan en el concepto de composición local. En las disoluciones líquidas, se presume que las composiciones locales, diferentes de la composición general de las mezclas, explican las diferencias en el tamaño molecular y en las fuerzas intermoleculares. Este concepto fue introducido por G. M. Wilson en 1964 con la publicación de un modelo de comportamiento de disolución conocido como la ecuación de Wilson (4). La ecuación de Wilson es un modelo para el cálculo de los coeficientes de actividad del componente i en la mezcla líquida a partir de la siguiente expresión para la energía libre de Gibbs exceso molar de la mezcla. Esta ecuación consta de dos parámetros para un sistema binario (A_{12} y A_{21}) y se escribe de la siguiente manera.

$$\frac{G^E}{RT} = -x_1 \ln(x_1 + x_2 A_{12}) - x_2 \ln(x_2 + x_1 A_{21}) \quad \text{Ecuación 8}$$

Los parámetros Λ_{12} y Λ_{21} dependen de la temperatura según la Ecuación 9. En donde V_i y V_j son los volúmenes molares de los líquidos puros i y j (cm^3/mol), y a_{ij} es una constante independiente de la composición y la temperatura.

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_j}{V_i} \exp\left(\frac{-a_{ij}}{RT}\right) \quad i \neq j \quad \text{Ecuación 9}$$

De esta manera, a partir de estos parámetros es posible calcular los coeficientes de actividad correspondientes para la mezcla binaria empleando las ecuaciones 10 y 11.

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + x_2 \Lambda_{12}) + x_2 \left[\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}} \right] \quad \text{Ecuación 10}$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + x_1 \Lambda_{21}) - x_1 \left[\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}} \right] \quad \text{Ecuación 11}$$

Las ecuaciones anteriormente mostradas representan el modelo de Wilson, el cual se ha construido dentro de una dependencia aproximada de la temperatura para los parámetros. En la Tabla 6 se presentan los valores recomendados por las bibliografías (4) correspondientes a los parámetros de la ecuación de Wilson para el sistema Metanol-Agua, siendo estas sustancias simbolizadas por los números 1 y 2, respectivamente.

Tabla 6. Parámetros de ecuación de Wilson para el sistema Metanol-Agua. Fuente: (4)

$V_1, \text{cm}^3/\text{mol}$	$V_2, \text{cm}^3/\text{mol}$	$a_{12}, \text{J/mol}$	$a_{21}, \text{J/mol}$
40,73	18,07	449,58	1965,91

Estimación de datos de equilibrio líquido-vapor

El procedimiento para el cálculo de los datos del equilibrio líquido-vapor del sistema se basa en un proceso iterativo en el que, para cierta composición molar de metanol en fase líquida, x_1 , se estima la temperatura a la que esta se encuentra en equilibrio con la fase vapor.

Se llevará a cabo el ajuste del primer punto de la curva de equilibrio, el de una fracción molar de metanol de $x_1=0,95$. La composición de agua, x_2 , se calcula directamente, conociendo que el sumatorio de las composiciones del líquido en el equilibrio debe ser igual a la unidad, como se puede observar en la Ecuación 12.

$$\sum_i x_i = x_1 + x_2 = 1 \quad \text{Ecuación 12}$$

Debido a la alta concentración de metanol, la temperatura de equilibrio será muy próxima a la de ebullición de este compuesto puro, por lo que se estima un valor de 65 °C. Con la primera estimación de temperatura, es posible obtener los valores de los parámetros de la ecuación de Wilson empleando la Ecuación 9. Una vez calculados, se procede a sustituirlos en las ecuaciones 10 y 11 para conocer los coeficientes de actividad correspondientes de ambas especies.

Finalmente, son calculadas las presiones de vapor del metanol y del agua y aplicadas a la Ecuación 3, mediante la cual es posible conocer las composiciones de cada sustancia, 1 y 2, en fase vapor. La prueba de convergencia en este caso es la mostrada en la Ecuación 13, el sumatorio de estas composiciones, ya que, del mismo modo que en la fase líquida, el total deberá ser 1. Si esto no sucede, se deberá recalcular estimando un nuevo valor de temperatura.

$$\sum_i y_i = y_1 + y_2 = 1 \quad \text{Ecuación 13}$$

En la Tabla 7 se muestran los valores resultantes del cálculo para el primer punto de la curva de equilibrio del sistema Metanol-Agua.

Tabla 7. Resultados del ajuste del punto $x_1 = 0,95$ de la curva de equilibrio L-V

Compuesto	Presión, <i>bar</i>	Temperatura, °C	x _i	A _{ij}	γ _i	P _i ^o , <i>bar</i>	y _i
Metanol (1)	1,013	65,26	0,95	0,378	1,001	1,044	0,980
Agua (2)			0,05	1,121	1,609	0,253	0,020
						Suma:	1

El proceso de cálculo recientemente explicado es repetido para el resto de los puntos de la curva de equilibrio, desde $x_1 = 0$ hasta $x_1 = 1$. Los resultados son recogidos en la Tabla 8.

Tabla 8. Datos de equilibrio líquido-vapor del sistema Metanol-Agua según ajuste de ecuación de Wilson

Temperatura, °C	x_1	y_1
64,50	1,000	1,000
65,26	0,950	0,980
66,05	0,900	0,960
67,68	0,800	0,919
69,41	0,700	0,877
71,27	0,600	0,833
73,32	0,500	0,785
74,45	0,450	0,759
75,67	0,400	0,731
77,01	0,350	0,700
78,51	0,300	0,665
80,24	0,250	0,623
82,30	0,200	0,572
84,85	0,150	0,505
88,18	0,100	0,412
89,84	0,080	0,362
91,25	0,065	0,318
92,84	0,050	0,266
95,30	0,030	0,180
97,47	0,015	0,100
99,99	0,000	0,000

Asimismo, estos datos son dibujados en la Figura 2 junto con los bibliográficos en una gráfica donde se observa la composición del metanol en fase vapor frente a la de la fase líquida, con el fin de conseguir una comparación entre ambos y verificar así la precisión del modelo de Wilson en este sistema. Es posible verificar que, efectivamente, el modelo se ajusta con un error mínimo a los datos reales, por lo cual se considera adecuado y será empleado en el cálculo de los valores de equilibrio requeridos en la torre de destilación a diseñar.

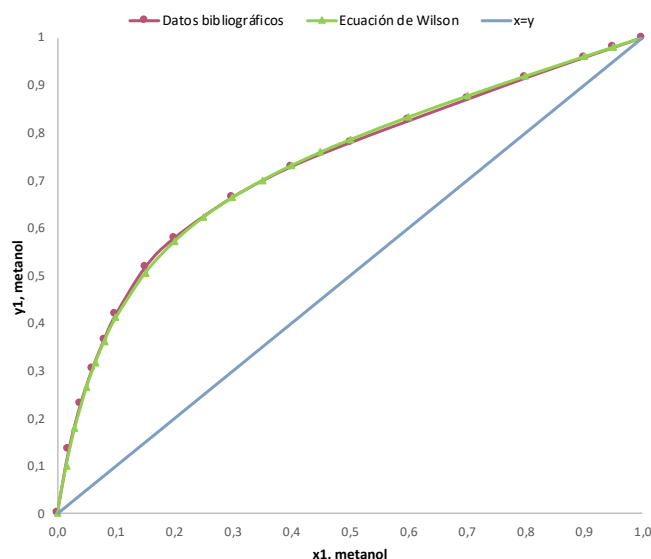


Figura 2. Curva de equilibrio del sistema Metanol-Agua. Datos bibliográficos (rojo) vs. Ecuación de Wilson (verde)

Finalmente, en la Figura 3 se muestra un diagrama donde se encuentra representada la temperatura frente a las fracciones molares del metanol, usualmente llamado diagrama de equilibrio T-x-y a partir de los datos determinados con el modelo de Wilson. En este se puede detallar la curva del punto de burbuja en la parte inferior, así como la del punto de rocío, en la superior.

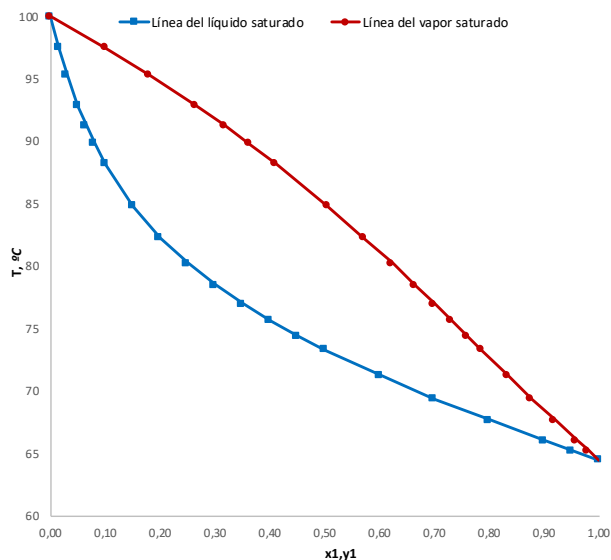


Figura 3. Diagrama T-x-y del sistema Metanol-Agua a partir de la ecuación de Wilson

2.3.3. Temperaturas de burbuja y de rocío

Con el fin de estimar la temperatura de cada etapa de la columna, así como la del condensador y la caldera, son necesarios procedimientos de cálculo para conocer los puntos de burbuja y rocío. Es importante aclarar que un líquido saturado se encuentra en su punto de burbuja, pues cualquier aumento de temperatura causaría la formación de burbujas de vapor, y, de la manera contraria, se dice que un vapor saturado está a su temperatura de rocío, ya que una disminución de temperatura provocaría gotas de líquido en la mezcla. Estos dos parámetros fundamentales pueden ser calculados a partir del equilibrio líquido-vapor en el sistema, conociendo que los sumatorios de las fracciones molares de ambos componentes deben ser iguales a la unidad, tanto en el caso del líquido como del vapor (2).

En el subapartado de nombre *Estimación de datos de equilibrio líquido-vapor* se presenta un procedimiento de cálculo de los datos de equilibrio a partir de las composiciones de la fase líquida. En realidad, este explica la secuencia de cálculo necesaria para determinar la temperatura de burbuja de una mezcla. Por otro lado, para conocer la temperatura de rocío partiendo de la composición de la mezcla en fase vapor será necesario otro proceso de cálculo iterativo. Sin embargo, en este caso se ha de variar más factores que en el caso anterior: la temperatura y los coeficientes de actividad. El orden de operaciones se presenta a continuación.

Conocidas las fracciones molares del metanol y del agua en fase vapor, el primer paso del procedimiento consiste en estimar la temperatura de equilibrio. Con esta es posible calcular las presiones de vapor de ambos componentes mediante la Ecuación 4 y los parámetros de la ecuación de Wilson con la Ecuación 9. Asumiendo un valor inicial de 1 para los coeficientes de actividad, se estiman x_1 y x_2 usando la Ecuación 3. Estas fracciones molares se sustituyen en las ecuaciones 10 y 11 para recalcular los coeficientes de actividad correspondientes de ambas especies. A continuación, será necesario comparar los valores asumidos y los calculados, si estos no coinciden, se deberá repetir este proceso, y si, por el contrario, estos son iguales, se considera finalizada esta parte del cálculo. Seguidamente, habrá que comprobar que la suma de los valores de x_1 y x_2 sea igual a 1. Si esto no ocurre, es preciso volver al inicio del procedimiento estimando una nueva temperatura de rocío.

Las operaciones explicadas anteriormente conllevan una serie de cálculos engorrosos, por lo tanto, a lo largo del diseño del equipo se hará uso de una herramienta informática muy útil, específicamente una hoja de cálculo, con la que se resolverán las operaciones iterativas mediante un método de prueba y error automatizado.

2.3.4. Modo de operación

Es ineludible decidir si la columna de destilación trabajará en régimen continuo o discontinuo. Este último debería ser considerado cuando la cantidad a destilar es pequeña, cuando se produce

un rango muy diverso de productos, cuando la alimentación es producida a intervalos irregulares o cuando su composición varía de forma exagerada (2). En este caso, ninguna de las condiciones anteriores aplica, y, además, la planta de producción para la cual será útil la columna operará de forma continua. Por lo tanto, no existe duda de que esta también debe operar en régimen continuo.

2.4. Tipo de dispositivo de contacto

Las columnas de destilación pueden emplear platos o relleno para promover el contacto entre fases. La elección entre ambas opciones se suele basar en la experiencia, tomando en cuenta diversas consideraciones, entre las que se encuentran las siguientes (2):

- Las columnas de platos son capaces de manejar un rango mayor de caudales de líquido y gas.
- Las columnas de relleno no son adecuadas para flujos muy bajos de líquido.
- La eficiencia de un plato se puede predecir con más certeza que la del relleno.
- Las columnas de platos pueden ser diseñadas con mayor garantía con respecto a la distribución de líquido a lo largo de esta bajo todas las condiciones de operación.
- Resulta más sencillo instalar salidas laterales en las columnas de platos.
- Es posible instalar bocas de hombre en las de platos, facilitando la limpieza y mantenimiento.

Por otro lado, las columnas de relleno son recomendadas en los siguientes casos:

- Al trabajar con fluidos corrosivos.
- Cuando se desea reducir el inventario de líquidos tóxicos o inflamables por razones de seguridad, pues estas columnas tienen una menor retención de líquido.
- Cuando se trata con sistemas que generan espuma.
- Si la columna opera a vacío.
- En columnas de diámetros pequeños, menores a 0,6 metros.

En este caso, no se satisface ninguna de las condiciones expuestas para la selección de una columna de relleno. Y, considerando todas las ventajas de las columnas de platos, se decide que sea esta la configuración de contacto del equipo.

2.5. Número de etapas de equilibrio

Para diseñar una columna de destilación, es fundamental conocer el número de etapas de equilibrio y la relación de reflujo necesarias para conseguir la separación deseada. Para ello, dependiendo de si la columna es binaria o multicomponente se emplean distintas técnicas. Como diseño preliminar, en caso de ser binaria, es posible llevar a cabo un método gráfico aproximado ventajoso para tener una primera noción rápida del sistema. Una vez efectuado este procedimiento simplificado, se procederá a realizar un diseño riguroso a la columna, en este caso mediante la aplicación del conjunto de ecuaciones MESH en cada una de las etapas teóricas de equilibrio.

2.5.1. Diseño simplificado de la columna

El desafío de diseñar una columna de destilación deriva de la necesidad de resolver múltiples ecuaciones de manera simultánea en cada una de las etapas, o mediante mecanismos de prueba y error muy lentos y laboriosos. Durante el siglo pasado se llevaron a cabo numerosas investigaciones acerca de esta operación, en las cuales se analizaron sistemas binarios y se desarrollaron ciertas ecuaciones básicas para su diseño. Específicamente, se trata de balances de materia, totales y por componente, así como de energía. En la parte a de la Figura 4 se muestran los flujos y composiciones en la sección de enriquecimiento de la columna, así como el sistema considerado para la aplicación de las ecuaciones en la misma. Del mismo modo se observa en la parte b para la zona de agotamiento, incluyendo la caldera.

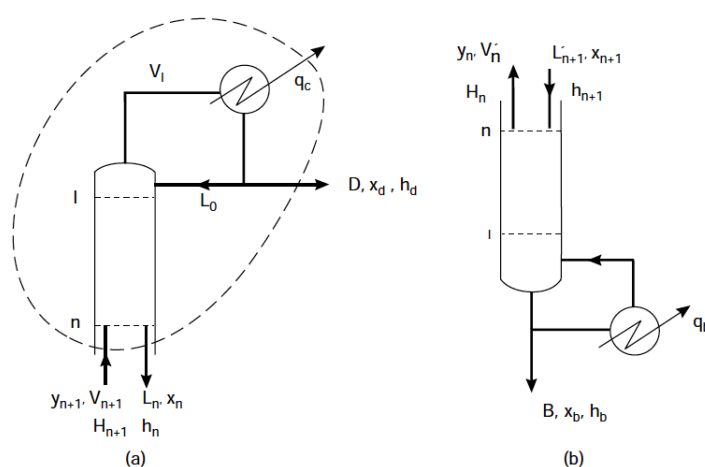


Figura 4. Flujos y composiciones de una columna de destilación en las secciones de a) enriquecimiento y b) agotamiento. Fuente: (2)

En 1922 Lewis observó que, en muchos casos, los caudales de líquido y vapor eran constantes en cada sección de la columna. Esto ocurre asumiendo que, por cada mol de vapor que se condensa, un mol de líquido es vaporizado. Esta serie de condiciones fue denominada *Constant molar overflow (CMO)* lo que se traduce a flujo molar constante (3).

Partiendo de la consideración de que el CMO es válido, los balances de energía en cada etapa automáticamente se satisfacen. Por lo tanto, las ecuaciones que quedan por resolver serían los balances de materia. A partir de ellos, es posible desarrollar la Ecuación 14, denominada línea de operación de la sección de enriquecimiento, donde han sido simplificados los caudales de líquido y vapor, L y V , proporcionándoles un valor único para dicha sección. Además, n representa cada una de las etapas de la columna.

$$y_{n+1} = \frac{L}{V} x_n + \frac{D}{V} x_d \quad \text{Ecuación 14}$$

Asimismo, se presenta la ecuación que representa la línea de operación de la sección de agotamiento en la Ecuación 15. En esta L' y V' hacen referencia a los caudales de líquido y vapor en la zona inferior de la columna.

$$y_n = \frac{L'}{V'} x_{n+1} - \frac{B}{V'} x_b \quad \text{Ecuación 15}$$

Para una etapa de equilibrio, las composiciones de las corrientes de líquido y vapor abandonando dicha etapa son proporcionadas por la relación de equilibrio.

Método de McCabe-Thiele para destilación binaria

Basados en el método de Lewis, McCabe y Thiele desarrollaron una técnica de resolución gráfica observando que las líneas de operación son rectas en un diagrama x-y. En este, las relaciones de equilibrio se pueden resolver a partir de la curva de equilibrio y los balances de energía mediante las rectas de operación. El procedimiento de este método se detalla a continuación:

1. Dibujar la curva de equilibrio líquido-vapor a la presión a la que opera la columna. Esto fue llevado a cabo con antelación y es reflejada en la Figura 2.
2. Resolver un balance de materia alrededor de la columna para determinar las composiciones de los productos de cabezas y colas. En este caso, al definir las corrientes de salida fue aplicado este balance.
3. Las rectas de operación de las partes superior e inferior de la columna intersecan la diagonal $x=y$ en las composiciones x_d y x_b , respectivamente. Por lo que estos puntos son marcados en el diagrama.
4. El lugar donde intersecan ambas rectas de operación coincide con la alimentación, y depende directamente de la fase en la que esta se encuentre. La línea en la que ocurre la intersección se denomina la recta de alimentación. Esta se puede expresar en función de la fracción de líquido de la corriente de alimentación, q , según la Ecuación 16. Para el sistema en cuestión, q toma el valor de 1 al ser un líquido saturado.

$$y = \frac{q}{q-1} x + \frac{1}{1-q} z_f \quad \text{Ecuación 16}$$

5. Seleccionar la relación de reflujo. El número de etapas de equilibrio necesarias para conseguir cierta separación dependerá de esta. Es normalmente definida como:

$$R = \frac{\text{flujo retornado a la columna}}{\text{caudal de destilado}} = \frac{L_0}{D} \quad \text{Ecuación 17}$$

En una columna de destilación se presentan dos condiciones de operación limitantes. El reflujo total y el reflujo mínimo. Estas se resumen a continuación.

- Reflujo total: se trata de la condición en la cual todo el producto condensado es retornado a la columna. Las etapas requeridas para esta operación serán el número mínimo de etapas

teóricas necesarias para alcanzar la separación deseada. Al reintroducir todo el vapor que sube por la columna, $\frac{L}{V}$ se convierte en 1, del mismo modo ocurre con $\frac{L'}{V'}$. Por lo tanto, las líneas de operación coinciden con la recta $x=y$.

- Reflujo mínimo: se define como la relación de reflujo a la cual solo se conseguiría la separación deseada con un número infinito de etapas. Este caso se da cuando una recta de operación interseca la curva de equilibrio. Esto significaría que las corrientes en ese punto se encuentran en equilibrio, por lo que no existirá fuerza impulsora para la transferencia de materia y se estancará la operación. Al punto de la curva donde esto ocurre se le denomina *pinch point*, y marca el mínimo reflujo necesario para llevar a cabo la separación.

La relación de reflujo óptima será aquella que minimice los costes totales de la columna. Por un lado, al incrementarla se reducirán las etapas necesarias, lo que disminuye la inversión de capital para el equipo, sin embargo, aumentarán los requerimientos de utilidades para la caldera y condensador. En la literatura (2) se suelen recomendar valores entre 1,2 y 1,5 veces el reflujo mínimo.

6. Dibujar las rectas de operación de enriquecimiento y agotamiento, cuyas pendientes son $\frac{L}{V}$ y $\frac{L'}{V'}$, respectivamente.
7. Partiendo de x_d o x_b dibujar las etapas en forma de escalera para conocer el número necesario. La caldera, al evaporar solo parcialmente el líquido introducido, representa la etapa de equilibrio final de la columna.

Finalmente, la alimentación deberá ser introducida en el plato más cercano a la intersección entre las líneas operativas (2).

Resultados del método McCabe-Thiele

Empleando del método McCabe-Thiele se encontraron los resultados comentados en las próximas líneas. En la Figura 5 se presenta el diagrama donde fue representada la condición de reflujo total, a partir del cual se determinó el número mínimo de etapas $N_{mín}$. Por otra parte, la relación de reflujo mínimo se consiguió mediante un método de prueba y error que condujo a encontrar el *pinch point* en el sistema, presentado en la Figura 6. En la Tabla 9 se resumen los resultados obtenidos de este análisis, así como el reflujo real que será empleado en el diseño de la columna, partiendo de la consideración de que es 1,5 veces el $R_{mín}$.

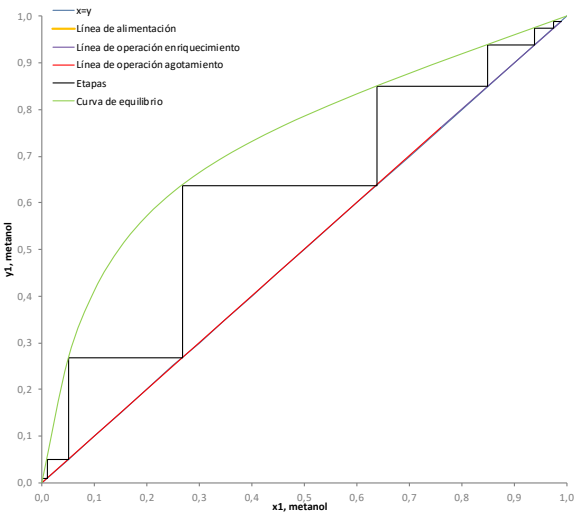


Figura 5. Método de McCabe-Thiele en condición de reflujo total

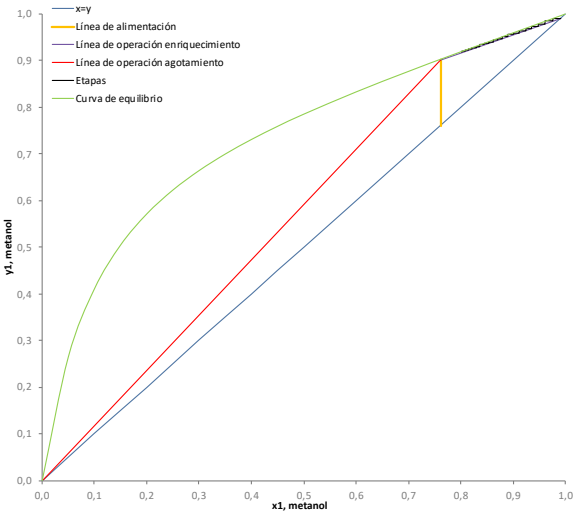


Figura 6. Método de McCabe-Thiele en condición de reflujo mínimo

Tabla 9. Datos de reflujo y etapas mínimas de la columna

Parámetro	Valor
Nmín	8
Rmín	0,644
R	0,966

Una vez conocida la relación de reflujo a utilizar, se procede a presentar el método de McCabe-Thiele en las condiciones a las que operará el equipo, es importante aclarar cómo se determinaron los caudales de vapor y líquido resultantes en la columna. En la sección de enriquecimiento el flujo de líquido se obtiene directamente a partir de la Ecuación 17, y, aplicando un balance de materia en el condensador como el mostrado en la Ecuación 18, se puede conocer el de vapor.

$$V = L + D \tag{Ecuación 18}$$

Del mismo modo, en la zona de agotamiento se aplica un balance de materia en la etapa donde se introduce la alimentación. Al ser esta una corriente líquida, cuando ingresa a la columna se une al flujo líquido que baja desde la sección superior, siendo entonces el flujo de vapor, V' , idéntico al de la zona de enriquecimiento, V . Estos datos se resumen en la Tabla 10.

Tabla 10. Resultados de caudales dentro de la columna

Parámetro	Valor
q	1
L , kmol/h	2423,78
V , kmol/h	4932,08
L/V	0,49
L' , kmol/h	5689,19
V' , kmol/h	4932,08
L'/V'	1,15

Los resultados de graficar el método de McCabe-Thiele son mostrados en las figuras 7 y 8, a partir de estos se conoce que el número de etapas de equilibrio necesarias para llevar a cabo la separación es de 14, es decir, 13 etapas dentro de la columna y la caldera. Además, la alimentación debería ser introducida en el plato número 8.

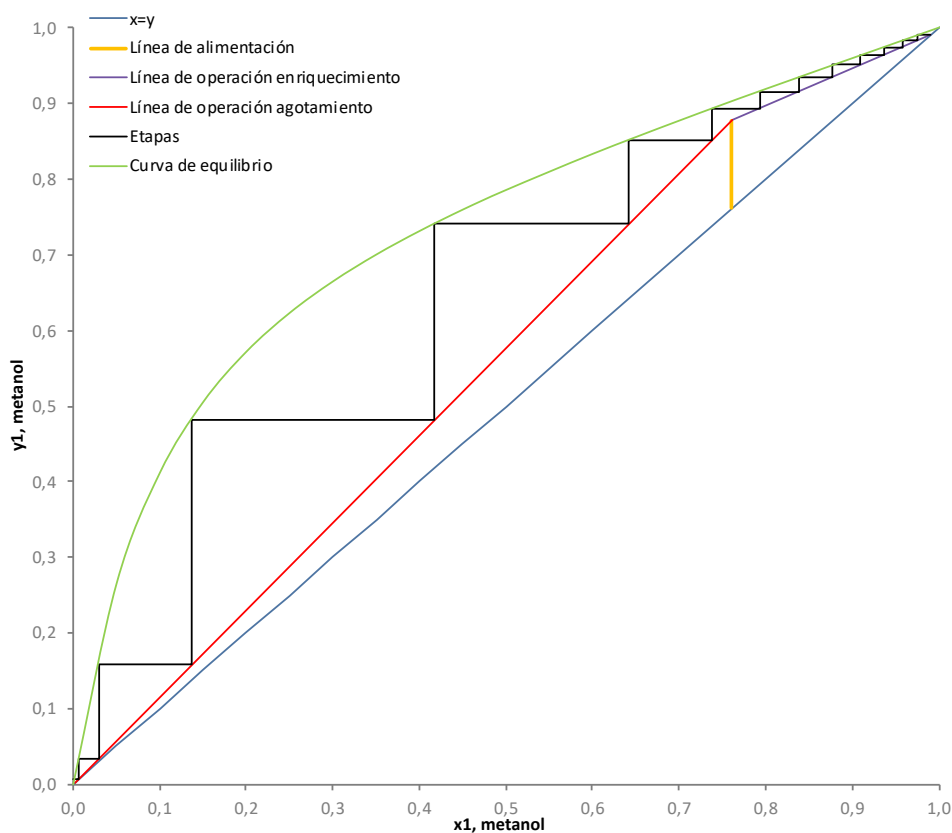


Figura 7. Método de McCabe-Thiele con una relación de reflujo de 0,966

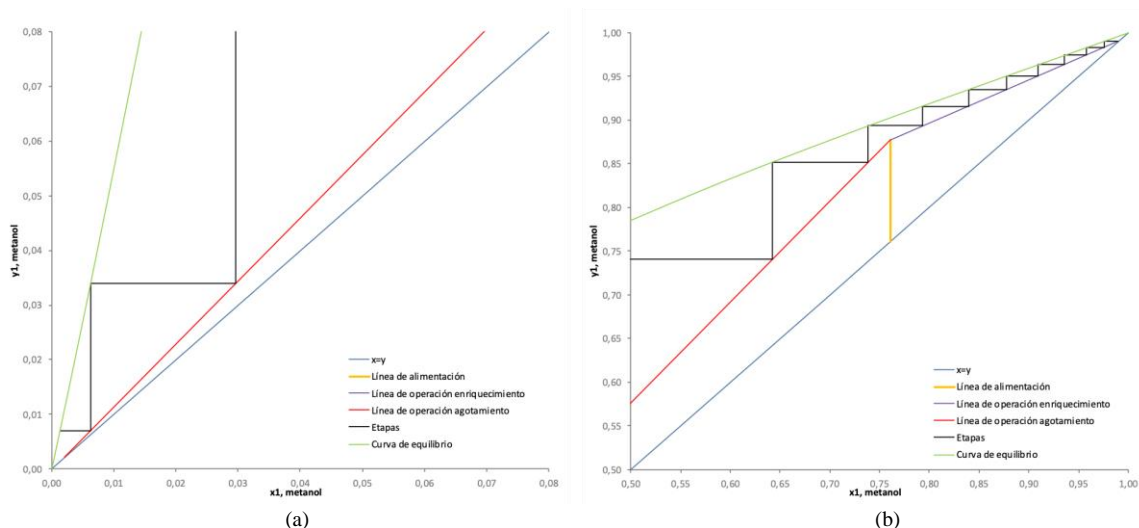


Figura 8. Método de McCabe-Thiele detallado en zona a) inferior y b) superior

Cabe destacar que este resultado es meramente orientativo, y es empleado para tener una noción de los valores que tendrán los datos, tales como el número de etapas, al momento de realizar el desarrollo del diseño riguroso de la columna, el cual será el definitivo. Adicionalmente, la relación de reflujo óptima a la que operará la columna es la calculada mediante este método gráfico, pues se considera una aproximación ciertamente adecuada.

2.5.2. Diseño riguroso de la columna

Cuando se habla de diseño riguroso de una columna de destilación, se hace referencia al análisis de los parámetros termodinámicos de la columna. Esto resulta en la obtención de los perfiles internos de concentración de los componentes, así como el perfil de temperaturas y los caudales de vapor y líquido en cada etapa.

Desde hace décadas han sido desarrollados nuevos modelos de simulación rigurosa para columnas de destilación, especialmente desde el gran avance y mayor disponibilidad de nuevas tecnologías computacionales. La mayoría de estos están basados en el concepto de etapas de equilibrio y difieren principalmente en el proceso de iteración llevado a cabo (1).

Ecuaciones MESH

La serie de ecuaciones MESH es bien conocida dentro de los modelos exactos de diseño. Su nombre deriva de las iniciales en inglés de cada tipo de ecuación empleada. Esas son aplicadas a todas las etapas de equilibrio presentes en un proceso de destilación, en las cuales los flujos de entrada y salida típicos son los mostrados en la Figura 9. A continuación, será señalada cada ecuación aplicada a la etapa genérica n representada en esta figura.

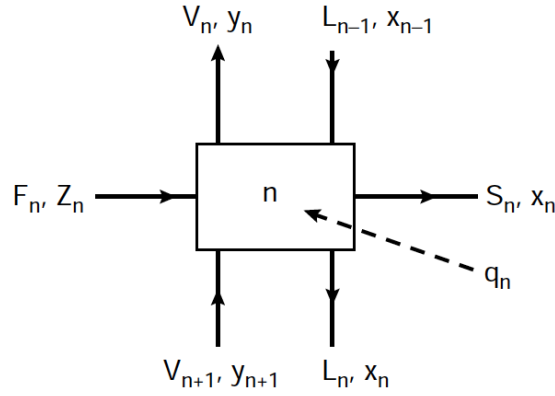


Figura 9. Caudales de entrada y salida en la etapa n de una columna de destilación. Fuente: (2)

Ecuaciones M : hacen referencia a los balances de materia por componente.

$$V_{n+1} y_{n+1} + L_{n-1} x_{n-1} + F_n z_n = V_n y_n + L_n x_n + S_n x_n \quad \text{Ecuación 19}$$

Ecuaciones H : hacen referencia a los balances de energía.

$$V_{n+1} H_{n+1} + L_{n-1} h_{n-1} + F_n h_f + q_n = V_n H_n + L_n h_n + S_n h_n \quad \text{Ecuación 20}$$

Donde,

V_n es el caudal de vapor que abandona el plato,

V_{n+1} es el caudal de vapor que ingresa al plato desde la etapa inferior,

L_n es el caudal de líquido que abandona el plato,

L_{n-1} es el caudal de líquido que entra al plato desde la etapa superior,

F_n es cualquier caudal de alimentación al plato,

S_n es cualquier salida lateral del plato,

q_n es el flujo de calor aportado o retirado del plato,

n es cualquier etapa, estas son numeradas desde cabezas de la columna,

z es la fracción molar del componente i en la corriente de alimentación,

x es la fracción molar del componente i en las corrientes líquidas,

y es la fracción molar del componente i en las corrientes de vapor,

h es la entalpía específica de las corrientes líquidas,

H es la entalpía específica de las corrientes de vapor,

h_f es la entalpía específica de la corriente de alimentación.

Todos los flujos se encuentran en $kmol/h$ y las entalpías específicas en $kJ/kmol$.

Las ecuaciones E y S fueron introducidas anteriormente en el apartado 2.3.2, estas se refieren a las relaciones de equilibrio líquido-vapor y a la sumatoria de las fracciones molares en fase líquida y vapor, respectivamente. Con el propósito de recordarlas, son expuestas a continuación.

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^o \quad \text{Ecuación 3}$$

$$\sum_i x_{i,n} = \sum_i y_{i,n} = 1 \quad \text{Ecuaciones 12 y 13}$$

Determinación de entalpías específicas

La entalpía es una propiedad termodinámica relacionada con la energía interna, ampliamente utilizada en cálculos de cantidades de calor en procesos prácticos, debido a que es una propiedad de la materia que se puede medir y tabular en función de la temperatura y presión.

Por otro lado, la capacidad calorífica se define como la cantidad de energía requerida para variar la temperatura de una unidad de masa (o molar) un grado (4). La capacidad calorífica a presión constante, C_p , también conocida como calor específico si se refiere a una unidad molar, será la propiedad empleada en este diseño para el cálculo de las entalpías específicas a presión constante. El calor específico de un líquido aumenta a medida que la temperatura es incrementada. Existen numerosas técnicas para determinar la capacidad calorífica de un componente puro en función de la temperatura. En este caso, serán calculadas para cada uno de los componentes presentes en la columna, metanol y agua, mediante el uso de la Ecuación 21.

$$C_p = C_1 + C_2 \cdot T + C_3 \cdot T^2 + C_4 \cdot T^3 + C_5 \cdot T^4 \quad \text{Ecuación 21}$$

Donde C_p representa el calor específico del líquido (J/kmol K), T la temperatura (K) y C_1, C_2, C_3, C_4 y C_5 son los coeficientes de la ecuación, únicos para cada compuesto. En la Tabla 11 se recogen estos coeficientes para el metanol y el agua.

Tabla 11. Coeficientes para el cálculo de los calores específicos de las sustancias puras. Fuente: (6)

Compuesto	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
Metanol	105800	-362,23	0,9379	0	0
Agua	276370	-2090,1	8,125	-0,014116	9,3701E-06

La entalpía de una corriente líquida (J/kmol) se puede calcular mediante la Ecuación 22. Es importante recalcar que esta expresión representa una diferencia de entalpías, por lo que se deberá tomar una de referencia, que finalmente se cancelará al realizar los balances de energía.

$$\Delta h = h - h_R = \int_{T_R}^T C_p dT \quad \text{Ecuación 22}$$

Una vez solucionada la integral, la ecuación queda de la siguiente forma:

$$\Delta h = h - h_R = \left(C_1 \cdot T + \frac{C_2}{2} \cdot T^2 + \frac{C_3}{3} \cdot T^3 + \frac{C_4}{4} \cdot T^4 + \frac{C_5}{5} \cdot T^5 \right)_{T_R}^T \quad \text{Ecuación 23}$$

De esta manera, es posible simplificar la expresión de la entalpía de un líquido, considerando una entalpía de referencia de valor cero, resultando así la Ecuación 24.

$$h_i = C_1 \cdot T + \frac{C_2}{2} \cdot T^2 + \frac{C_3}{3} \cdot T^3 + \frac{C_4}{4} \cdot T^4 + \frac{C_5}{5} \cdot T^5 \quad \text{Ecuación 24}$$

Del mismo modo, la entalpía de un vapor se puede calcular a través de la Ecuación 25.

$$H_i = h_i + \lambda_i \quad \text{Ecuación 25}$$

Donde λ_i hace referencia al calor de vaporización de la especie pura (J/kmol). Los valores para las sustancias presentes en esta destilación fueron recolectados de un simulador de procesos. Estos se presentan en la Tabla 12.

Tabla 12. Calores de vaporización de las especies puras. Fuente: *Aspen HYSYS*

Compuesto	$\lambda_i, kJ/kmol$
Metanol	35290
Agua	40650

Finalmente, la entalpía de corrientes constituidas por mezclas de diversas sustancias es calculada mediante una media ponderada de las entalpías del componente puro según las fracciones molares, de acuerdo con las ecuaciones 26 y 27.

$$h = \sum_i h_i x_i \quad \text{Ecuación 26}$$

$$H = \sum_i H_i y_i \quad \text{Ecuación 27}$$

Cálculos etapa a etapa

El primer paso de este procedimiento consistirá en calcular las temperaturas en el condensador, la caldera y la corriente de alimentación. Para ello se llevan a cabo los cálculos reflejados en el apartado 2.3.3 *Temperaturas de burbuja y de rocío*. Es importante recordar que la presión en la columna se asumirá constante y tendrá un valor de 1 atmósfera, es decir, 1,013 bar.

- Condensador: al tratarse de un líquido saturado, la temperatura a la que se encuentra la corriente de destilado es la de burbuja, los resultados se muestran en la Tabla 13.

Tabla 13. Cálculos de temperatura de burbuja en condensador

Temperatura, °C: 64,65				
	x_d	P_i^o, bar	γ_i	$y_d = x_i \gamma_i P_i^o / P$
Metanol	0,990	1,019	1,000	0,996
Agua	0,010	0,246	1,653	0,004
Suma:				1

- Caldera: se calcula la temperatura de burbuja del líquido saturado producto de colas. En la Tabla 14 es posible observar el valor obtenido.

Tabla 14. Cálculos de temperatura de burbuja en caldera

Temperatura, °C: 99,60				
	x_b	P_i^o, bar	γ_i	$y_b = x_i \gamma_i P_i^o / P$
Metanol	0,002	3,495	2,131	0,016
Agua	0,998	0,999	1,000	0,984
	Suma:			1

- Alimentación: como es introducida a la columna como líquido saturado, se calcula de la misma forma su temperatura de burbuja, consiguiendo el valor presentado en la Tabla 15.

Tabla 15. Cálculos de temperatura de burbuja en corriente de alimentación

Temperatura, °C: 68,34				
	x_f	P_i^o, bar	γ_i	$y_f = x_i \gamma_i P_i^o / P$
Metanol	0,761	1,177	1,022	0,903
Agua	0,239	0,290	1,420	0,097
	Suma:			1

Balance de energía externo

Una vez conocidas estas temperaturas, es posible aplicar el balance de energía global a la columna con el fin de determinar el valor del calor retirado por el condensador, Q_C , y del aportado en la caldera, Q_b , dato que será útil más adelante. El balance de energía en el condensador, a partir de cual se determinará Q_C , está representado por la Ecuación 28, mientras que el total de la columna es la Ecuación 29, con esta se conocerá Q_b .

$$Q_C = D h_d + L_0 h_0 - V_1 H_1 \quad \text{Ecuación 28}$$

$$Q_b = D h_d + B h_b - F h_f - Q_C \quad \text{Ecuación 29}$$

Así, en la Tabla 16 se presentan los parámetros necesarios para el cálculo y en la Tabla 17 los resultados obtenidos del mismo. Cabe destacar que en los próximos apartados se explicará de forma detallada el cálculo de las entalpías específicas utilizadas en este balance.

Tabla 16. Parámetros para el balance de energía de la columna

Corriente	Caudal, kmol/h	Entalpía, kJ/kmol
D	2508,31	27259,80
L₀	2423,78	27259,80
V₁	4932,09	62624,33
F	3265,41	30713,59
B	757,10	43412,40

Tabla 17. Resultados del balance de energía externo de la columna

Parámetro	Valor
Q_C, kW	-48450,23
Q_b, kW	48714,44

A continuación, se procederá a iniciar el cálculo en la primera etapa. Debido a que en el condensador el cambio de fase es total, este no se considera una etapa de equilibrio, pues la composición del vapor que entra al equipo es igual a la del líquido que sale, cumpliéndose que $y_1 = x_d = x_0$.

Etapa 1

El primer plato de la columna tiene como corrientes de entrada el retorno del condensador L_0 , y V_2 , el vapor proveniente de la etapa inferior. Saliendo de esta etapa están las corrientes L_1 y V_1 , las cuales se encuentran en equilibrio. Esto es reflejado en la Figura 10.

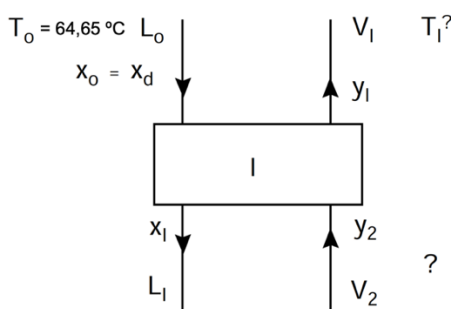


Figura 10. Corrientes presentes en la etapa 1

Empleando la relación de reflujo, es posible conocer el valor de L_0 mediante la Ecuación 17. Además, se calcula el valor de V_1 aplicando un balance de materia en el condensador como el mostrado en la Ecuación 30. Los resultados se especifican en la Tabla 18.

$$V_1 = L_0 + D$$

Ecuación 30

Tabla 18. Resultados del balance de materia en el condensador

Parámetro	Valor
R	0,966
D, kmol/h	2508,31
L_0 , kmol/h	2423,78
V_1 , kmol/h	4932,09
L_0/V_1	0,491

Seguidamente, es necesario estimar la temperatura de esta etapa. Conocidas las fracciones del vapor V_1 se calcula su temperatura de rocío para determinar la composición del líquido L_1 , obteniendo los resultados de la Tabla 19.

Tabla 19. Cálculo de la temperatura de rocío de la etapa 1

ETAPA 1		Temperatura, °C: 64,88		
	y_1	P_i^o , bar	γ_i	$x_1 = y_i P / \gamma_i P_i^o$
Metanol	0,990	1,029	1,000	0,975
Agua	0,010	0,249	1,637	0,025
Suma:				1

Las ecuaciones aplicadas a esta etapa se basan en las MESH, y son expuestas a continuación.

$$L_0 + V_2 = L_1 + V_1 \quad \text{Ecuación 31}$$

$$L_0 x_0 + V_2 y_2 = L_1 x_1 + V_1 y_1 \quad \text{Ecuación 32}$$

$$L_0 h_0 + V_2 H_2 = L_1 h_1 + V_1 H_1 \quad \text{Ecuación 33}$$

Previamente a realizar el balance de energía que permita calcular los caudales desconocidos L_1 y V_2 , se debe estimar la fracción molar y_2 , así como la temperatura de la siguiente etapa T_2 . Para esto, será necesario emplear la Ecuación 32, y, como primera aproximación se asumirá que el cociente $\frac{L_0}{V_1}$ se mantiene constante, quedando:

$$y_2 = \left(\frac{L_0}{V_1} \right) (x_1 - x_0) + y_1 \quad \text{Ecuación 34}$$

De esta manera, se calculan las composiciones del vapor, y_2 , y la temperatura de rocío de la etapa 2 a partir de estas, los resultados se muestran en la Tabla 20.

Tabla 20. Cálculo de la temperatura de rocío de la etapa 2

ETAPA 2		Temperatura, °C: 65,16		
	y_2	P_i°, bar	γ_i	$x_2 = y_i P / \gamma_i P_i^\circ$
Metanol	0,983	1,040	1,001	0,957
Agua	0,017	0,252	1,617	0,043
Suma:				1

Una vez hecho esto, es posible proceder a aplicar un balance energético en la etapa 1. Las entalpías específicas serán determinadas empleando las ecuaciones 24, 25, 26 y 27. Y son recogidas en la Tabla 21.

Tabla 21. Entalpías específicas. Valores expresados en kJ/kmol

	$h_0 (T_0=64,65^\circ\text{C})$			$h_1 (T_1=64,88^\circ\text{C})$		
	x_0	h_i	$h_i x_i$	x_1	h_i	$h_i x_i$
Metanol	0,990	27123,07	26851,84	0,975	27144,04	26464,18
Agua	0,010	40795,84	407,96	0,025	40813,30	1022,23
$h_0=$			27259,80	$h_1=$		
$H_1 (T_1=64,88^\circ\text{C})$				$H_2 (T_2=65,16^\circ\text{C} \text{ asumida})$		
	y_1	H_i	$H_i x_i$	y_2	H_i	$H_i x_i$
Metanol	0,990	62434,04	61809,70	0,983	62459,28	61372,85
Agua	0,010	81463,30	814,63	0,017	81484,31	1417,36
$H_1=$			62624,33	$H_2=$		

Aplicando los balances de energía y de materia representados en las ecuaciones 31 y 33 y resolviéndolos como un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas, se obtienen los resultados presentados en la Tabla 22.

Tabla 22. Resultados de balances de materia y energía en la etapa 2

Parámetro	Valor
$L_1, \text{ kmol/h}$	2416,16
$V_2, \text{ kmol/h}$	4924,47
L_1/V_2	0,491

Al comparar el valor asumido de L/V con el conseguido seguidamente a la realización de los balances, se observa que coinciden por completo, por lo que se considera correcto y se hace posible proceder a la siguiente etapa.

A continuación, se presenta una tabla a modo de resumen de todas las corrientes presentes en la primera etapa y los datos principales calculados.

Tabla 23. Características de las corrientes en la etapa 1

ETAPA 1	L_0	V_1	L_1	V_2
Caudal, kmol/h	2423,78	4932,09	2416,16	4924,47
Temperatura, °C	64,65	64,88	64,88	65,16
Metanol: x y	0,990	0,990	0,975	0,983
Agua: x y	0,010	0,010	0,025	0,017
h H, kJ/kmol	27259,80	62624,33	27486,41	62790,21

Etapa 2

En la segunda etapa las corrientes de entrada se corresponden con la líquida L_1 y la de vapor V_3 , mientras que las que abandonan el plato son las que se encuentran en equilibrio, L_2 y V_2 , como es posible observar en la Figura 11.

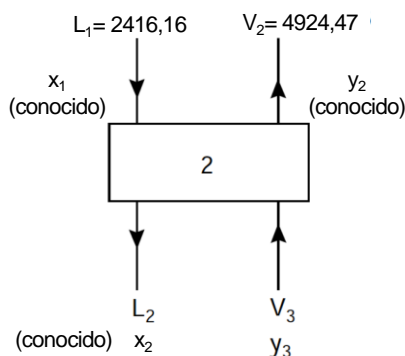


Figura 11. Corrientes presentes en la etapa 2

La temperatura T_2 y la fracción de líquido x_2 de la segunda etapa fueron previamente determinadas, por lo que se procede a estimar la composición de vapor y_3 del mismo modo que se hizo en el caso anterior, a partir de la Ecuación 35 y asumiendo que el cociente $\frac{L}{V}$ es igual al de la etapa previa, $\frac{L_1}{V_2}$. También, se calculan la temperatura de rocío y las fracciones molares en el líquido de la etapa 3, T_3 y x_3 . Los resultados se encuentran en la Tabla 24.

$$y_3 = \left(\frac{L}{V}\right) (x_2 - x_1) + y_2 \quad \text{Ecuación 35}$$

Tabla 24. Cálculo de la temperatura de rocío de la etapa 3

ETAPA 3		Temperatura, °C: 65,51		
	y_3	P_i, bar	γ_i	$x_3 = y_i P / \gamma_i P_i^o$
Metanol	0,974	1,055	1,002	0,934
Agua	0,026	0,256	1,592	0,066
Suma:				1

Asimismo, se calcularon las entalpías necesarias para llevar a cabo los respectivos balances de materia y energía y determinar así los caudales desconocidos de la etapa 3. Los resultados se reflejan en las tablas 25 y 26.

Tabla 25. Entalpías específicas. Valores expresados en *kJ/kmol*.

	h_2 ($T_2=65,16^\circ\text{C}$)			H_3 ($T_3=65,51^\circ\text{C}$ asumida)		
	x_2	h_i	$h_i x_i$	y_3	H_i	$H_i x_i$
Metanol	0,957	27169,28	25994,56	0,974	62491,43	60846,69
Agua	0,043	40834,31	1765,56	0,026	81511,04	2145,32
$h_2=$			27760,12	$H_3=$		
				62992,01		

Tabla 26. Resultados de balances de materia y energía en la etapa 3

Parámetro	Valor
L_2, kmol/h	2406,72
V_3, kmol/h	4924,47
L_2/V_3	0,490

Se verifica que el valor asumido L/V tiene muy poca variación con respecto al calculado, por lo que no hay necesidad de corregir el procedimiento. A continuación, se expone el resumen de esta etapa en la Tabla 27.

Tabla 27. Características de las corrientes en la etapa 2

ETAPA 2	L_1	V_2	L_2	V_3
Caudal, kmol/h	2416,16	4924,47	2406,72	4915,03
Temperatura, °C	64,88	65,16	65,16	65,51
Metanol: x y	0,975	0,983	0,957	0,974
Agua: x y	0,025	0,017	0,043	0,026
h H, kJ/kmol	27486,41	62790,21	27760,12	62992,01

El cálculo en la mayoría de las etapas es repetitivo, y, consecuentemente, se procederá a presentar solo los resultados definitivos obtenidos en cada una de ellas, posteriormente a la ejecución y comprobación de los procedimientos de prueba y error. Como excepción, se explicarán de forma

detallada etapas que requieran alguna variación de la técnica ya explicada, tales como el plato donde se introduce la alimentación y la caldera.

Etapa 3

En la etapa número 3 las corrientes que ingresan son L_2 y V_4 , mientras que las que abandonan el plato son las que se encuentran en equilibrio, L_3 y V_3 . En la Tabla 28 se muestran los parámetros más importantes de la etapa.

Tabla 28. Características de las corrientes en la etapa 3

ETAPA 3	L_2	V_3	L_3	V_4
Caudal, $kmol/h$	2406,72	4915,03	2395,34	4903,65
Temperatura, $^{\circ}C$	65,16	65,51	65,51	65,93
Metanol: x y	0,957	0,974	0,934	0,963
Agua: x y	0,043	0,026	0,066	0,037
h H, $kJ/kmol$	27760,12	62992,01	28099,87	63239,78

Etapa 4

Las corrientes de entrada son L_3 y V_5 , y las que abandonan el plato son las que están en equilibrio, L_4 y V_4 . En la Tabla 29 se recogen los parámetros de las corrientes de la etapa.

Tabla 29. Características de las corrientes en la etapa 4

ETAPA 4	L_3	V_4	L_4	V_5
Caudal, $kmol/h$	2395,34	4903,65	2381,48	4889,79
Temperatura, $^{\circ}C$	65,51	65,93	65,93	66,45
Metanol: x y	0,934	0,963	0,907	0,949
Agua: x y	0,066	0,037	0,093	0,051
h H, $kJ/kmol$	28099,87	63239,78	28505,76	63537,06

Etapa 5

Las corrientes de entrada a la etapa 5 son L_4 y V_6 y las de salida, L_5 y V_5 . En la Tabla 30 se especifican los datos de las corrientes presentes en la etapa en cuestión.

Tabla 30. Características de las corrientes en la etapa 5

ETAPA 5	L_4	V_5	L_5	V_6
Caudal, $kmol/h$	2381,48	4889,79	2364,76	4873,07
Temperatura, $^{\circ}C$	65,93	66,45	66,45	67,09
Metanol: x y	0,907	0,949	0,875	0,934
Agua: x y	0,093	0,051	0,125	0,066
h H, $kJ/kmol$	28505,76	63537,06	28996,47	63895,34

Etapa 6

En la etapa 6 ingresan las corrientes L_5 y V_7 , al mismo tiempo salen L_6 y V_6 . Se muestran en la Tabla 31 los datos de las corrientes presentes.

Tabla 31. Características de las corrientes en la etapa 6

ETAPA 6	L_5	V_6	L_6	V_7
Caudal, kmol/h	2364,76	4873,07	2344,80	4853,11
Temperatura, °C	66,45	67,09	67,09	67,85
Metanol: x y	0,875	0,934	0,836	0,915
Agua: x y	0,125	0,066	0,164	0,085
h H, kJ/kmol	28996,47	63895,34	29583,69	64322,59

Etapa 7

En la Tabla 32 son reflejados los parámetros principales de las corrientes de la etapa 7. Los flujos que se retiran en equilibrio de la etapa 7 son L_7 y V_7 . Por otro lado, los de entrada son L_6 y V_8 .

Tabla 32. Características de las corrientes en la etapa 7

ETAPA 7	L_6	V_7	L_7	V_8
Caudal, kmol/h	2344,80	4853,11	2320,17	4828,48
Temperatura, °C	67,09	67,85	67,85	68,84
Metanol: x y	0,836	0,915	0,790	0,893
Agua: x y	0,164	0,085	0,210	0,107
h H, kJ/kmol	29583,69	64322,59	30277,14	64833,04

Debido a la similitud entre la composición y temperatura de la corriente líquida que abandona esta etapa y las de la alimentación, esta será introducida en la siguiente etapa. De esta manera, será necesario añadir el término relacionado con esta corriente en los balances aplicados al plato.

Etapa 8

En esta etapa las corrientes de entrada se corresponden con la líquida del plato superior, L_7 , la de vapor del inferior V_9 y la de alimentación, F , la cual ingresa como un líquido saturado a la presión de trabajo de la columna. Del mismo modo, los flujos que abandonan la etapa son L_8 y V_8 . Esto se puede apreciar de manera gráfica en la Figura 12.

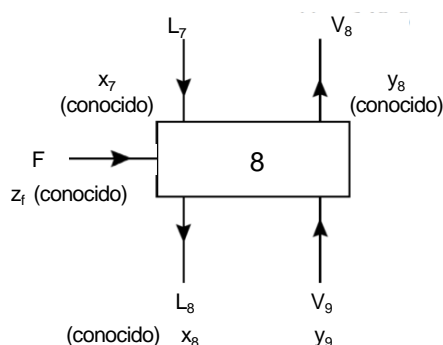


Figura 12. Corrientes presentes en la etapa 8

Se procede, entonces, a estimar la composición de vapor y_9 mediante los balances de materia por componentes. Para esto, se utiliza la Ecuación 36, y se asume que la corriente de vapor V_9 es igual a la del plato superior, V_8 , y que la corriente de líquido L_8 es igual a la suma de F y L_7 . Asimismo,

se calculan la temperatura de rocío y las fracciones molares en el líquido de la próxima etapa, 9, T_9 y x_9 . Los resultados se encuentran en la Tabla 33.

$$y_9 = \left(\frac{L}{V}\right) (x_8 - x_7) + \left(\frac{F}{V}\right) (x_8 - z_f) + y_8 \quad \text{Ecuación 36}$$

Tabla 33. Cálculo de la temperatura de rocío de la etapa 9

ETAPA 9		Temperatura, °C: 70,62		
	y_9	P_i°, bar	γ_i	$x_9 = y_i P / \gamma_i P_i^\circ$
Metanol	0,848	1,284	1,057	0,634
Agua	0,152	0,320	1,310	0,366
Suma:				1

De la misma forma, se determinaron las entalpías necesarias con el fin de conocer los caudales L_8 y V_9 . los balances de energía y materia aplicados a la etapa se reflejan en las ecuaciones 37 y 38.

$$F + L_7 + V_9 = L_8 + V_8 \quad \text{Ecuación 37}$$

$$F h_f + L_7 h_7 + V_9 H_9 = L_8 h_8 + V_8 H_8 \quad \text{Ecuación 38}$$

Los resultados se exponen en las tablas 34 y 35.

Tabla 34. Entalpías específicas. Valores expresados en kJ/kmol .

	h ₈ (T ₈ = 68,84°C)			H ₉ (T ₉ = 70,62°C asumida)		
	x ₈	h _i	h _i x _i	y ₉	H _i	H _i x _i
Metanol	0,735	27504,45	20206,28	0,848	62958,34	53402,97
Agua	0,265	41111,66	10908,78	0,152	81896,22	12429,63
h ₈ =			31115,06	H ₉ = 65832,60		
h _f (T _f = 68,34°C)						
		z _f	h _i	h _i x _i		
Metanol	0,761	27458,96	20895,07			
Agua	0,239	41074,19	9818,52			
			h _f =	30713,59		

Tabla 35. Resultados de balances de materia y energía en la etapa 8

Parámetro	Valor
$L_8, \text{kmol/h}$	5540,32
$V_9, \text{kmol/h}$	4783,22
L_8/V_9	1,158

A continuación, se expone el resumen de esta etapa en la Tabla 36.

Tabla 36. Características de las corrientes en la etapa 8

ETAPA 8	F	L₇	V₈	L₈	V₉
Caudal, kmol/h	3265,41	2320,17	4828,48	5540,32	4783,22
Temperatura, °C	68,34	67,85	68,84	68,84	70,62
Metanol: x y	0,761	0,790	0,893	0,735	0,848
Agua: x y	0,239	0,210	0,107	0,265	0,152
h H, kJ/kmol	30713,59	30277,14	64833,04	31115,06	65832,60

Etapa 9

En esta etapa se continúa con el procedimiento de cálculo explicado, siendo las corrientes de entrada L_8 y V_{10} , mientras que las de salida son L_9 y V_9 . En la Tabla 37 se muestran los resultados.

Tabla 37. Características de las corrientes en la etapa 9

ETAPA 9	L₈	V₉	L₉	V₁₀
Caudal, kmol/h	5540,32	4783,22	5421,73	4664,63
Temperatura, °C	68,84	70,62	70,62	75,66
Metanol: x y	0,735	0,848	0,634	0,731
Agua: x y	0,265	0,152	0,366	0,269
h H, kJ/kmol	31115,06	65832,60	32639,74	68487,43

Etapa 10

En la etapa número 10 entran los flujos L_9 y V_{11} , y la abandonan L_{10} y V_{10} . A continuación, en la Tabla 38 es posible detallar las características más importantes del décimo plato.

Tabla 38. Características de las corrientes en la etapa 10

ETAPA 10	L₉	V₁₀	L₁₀	V₁₁
Caudal, kmol/h	5421,73	4664,63	5194,54	4437,44
Temperatura, °C	70,62	75,66	75,66	86,49
Metanol: x y	0,634	0,731	0,400	0,460
Agua: x y	0,366	0,269	0,600	0,540
h H, kJ/kmol	32639,74	68487,43	36224,36	74518,92

Etapa 11

Las corrientes L_{10} y V_{12} representan los flujos de entrada a la etapa número 11, mientras que los de salida son L_{11} y V_{11} . Los resultados en esta etapa se muestran en la Tabla 39.

Tabla 39. Características de las corrientes en la etapa 11

ETAPA 11	L₁₀	V₁₁	L₁₁	V₁₂
Caudal, kmol/h	5194,54	4437,44	5033,63	4276,53
Temperatura, °C	75,66	86,49	86,49	96,52
Metanol: x y	0,400	0,460	0,123	0,136
Agua: x y	0,600	0,540	0,877	0,864
h H, kJ/kmol	36224,36	74518,92	40805,43	81351,96

Etapa 12

En esta etapa están presentes tanto las corrientes en equilibrio, L_{12} y V_{12} , como las que ingresan al plato, L_{11} y V_b . En la Tabla 40 se resumen los parámetros de las corrientes de la etapa 12.

Tabla 40. Características de las corrientes en la etapa 12

ETAPA 12	L_{11}	V_{12}	L_{12}	V_b
Caudal, kmol/h	5033,63	4276,53	5038,61	4281,51
Temperatura, °C	86,49	96,52	96,52	99,60
Metanol: x y	0,123	0,136	0,021	0,016
Agua: x y	0,877	0,864	0,979	0,984
h H, kJ/kmol	40805,43	81351,96	42927,21	83801,77

Caldera

La última etapa de equilibrio de la columna de destilación se encuentra en la caldera, externa al equipo. En el paso anterior se calculó la temperatura de la etapa, siendo 99,60 °C. Esta coincide con la de burbuja de la corriente de colas, por lo que se comprueba que se trata de la última etapa.

En este caso, la corriente de entrada a la caldera se corresponde con el líquido que baja desde el último plato de la columna, L_{12} , y las de salida son V_b , vapor que se reintroduce al equipo para una mejor separación y B , la corriente de salida por colas. Es necesario considerar, además, el calor que es aportado a la caldera, Q_b , con el fin de vaporizar el caudal a reinsertar en la torre. Para conocer el caudal de líquido, B , se llevan a cabo los balances de materia y energía en la caldera, según las siguientes ecuaciones:

$$L_{12} = B + V_b \quad \text{Ecuación 39}$$

$$L_{12} h_{12} + Q_b = B h_b + V_b H_b \quad \text{Ecuación 40}$$

Luego de aplicados los balances en esta etapa, se comprobó que la corriente líquida B coincide con la asumida al definir las corrientes y composiciones de salida de la columna. Las características de los flujos presentes en la caldera se recogen en la Tabla 41.

Tabla 41. Características de las corrientes en la última etapa: la caldera

CALDERA	L_{12}	V_b	B
Caudal, kmol/h	5038,61	4281,51	757,10
Temperatura, °C	96,52	99,60	99,60
Metanol: x y	0,021	0,016	0,002
Agua: x y	0,979	0,984	0,998
h H, kJ/kmol	42927,21	83801,77	43412,40

Resumen del método riguroso de diseño

Con el propósito de sintetizar el desarrollo explicado en las anteriores líneas, es posible decir que la columna de destilación en diseño constará de 12 platos teóricos sin contar la caldera, es decir,

13 etapas de equilibrio. La alimentación deberá ser introducida en la octava etapa. En la Figura 13 se presenta el perfil de fracciones molares en la columna y en la Figura 14 el de temperaturas.

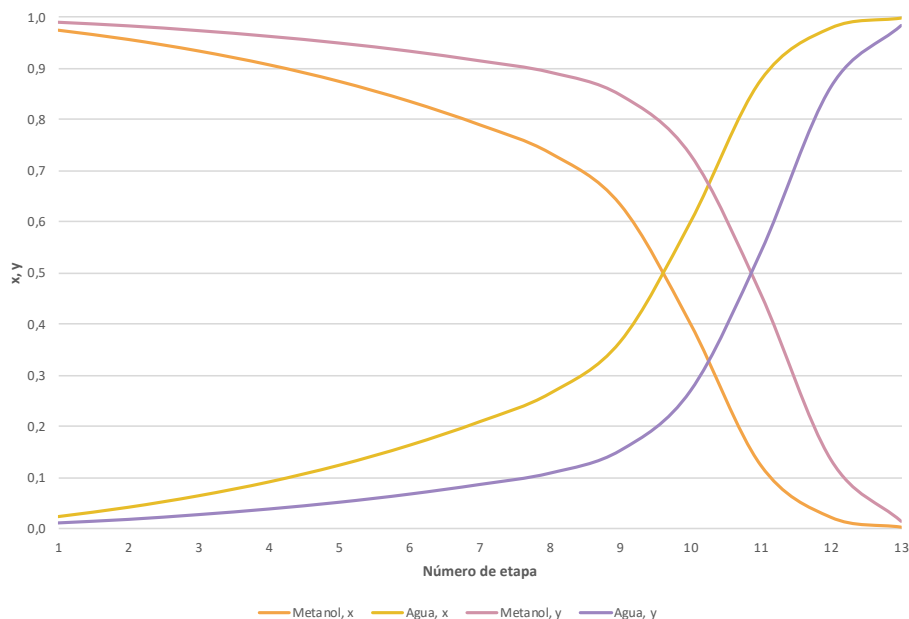


Figura 13. Perfil de composiciones en la columna T-304

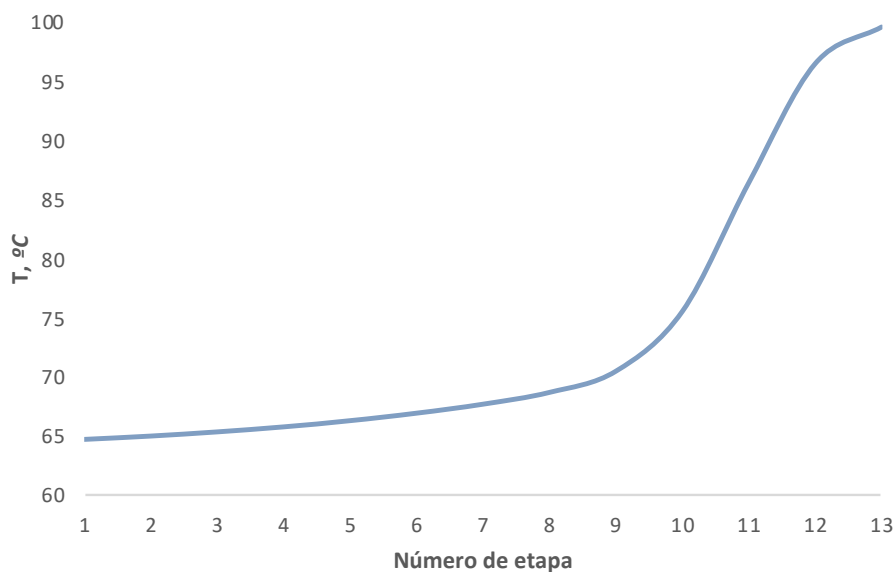


Figura 14. Perfil de temperaturas en la columna T-304

2.5.3. Eficiencia de la columna y número de etapas reales

En una columna de destilación real, es muy poco probable que el equilibrio sea alcanzado en cada etapa. Es por esto por lo que se emplea un término de eficiencia de la columna para relacionar los resultados teóricos con el rendimiento real que tendrá el equipo. La eficiencia global de la columna se define según la Ecuación 41, donde se excluye la caldera como etapa.

$$E_0 = \frac{n^{\circ} \text{ de etapas ideales}}{n^{\circ} \text{ de etapas reales}} \quad \text{Ecuación 41}$$

Correlación de O'Connell

O'Connell desarrolló una estimación de la eficiencia de la columna mediante una relación con la volatilidad relativa de los componentes a destilar y la viscosidad de la alimentación, estimada a la temperatura media de la columna. Esta correlación se puede expresar según la Ecuación 42 (2).

$$E_0 = 51 - 32,5 \log(\mu_a \alpha_a) \quad \text{Ecuación 42}$$

Donde μ_a hace referencia a la viscosidad media molar del líquido (mPa.s) y α_a a la volatilidad relativa de los componentes.

Para el cálculo de la viscosidad de las sustancias puras se emplea la correlación representada por la Ecuación 43 (5).

$$\ln \mu = A + \frac{B}{T} + C \cdot T + D \cdot T^2 \quad \text{Ecuación 43}$$

Donde μ se encuentra en mPa.s, T es la temperatura en K y A, B, C, D son las constantes de la correlación, únicas para cada compuesto. En la Tabla 42 se recogen estas constantes para los componentes presentes en la columna.

Tabla 42. Coeficientes para el cálculo de la viscosidad de las sustancias puras. Fuente: (5)

Compuesto	A	B	C	D
Metanol	-39,35	4826	0,1091	-1,127E-4
Agua	-24,71	4209	0,04527	-3,376E-5

Finalmente, para conocer la viscosidad total de la mezcla se emplea la Ecuación 44, considerando las fracciones molares de la alimentación y la temperatura media de la columna (6).

$$\ln (\mu_a) = \sum_i x_i \ln (\mu_i) \quad \text{Ecuación 44}$$

Por otro lado, la volatilidad relativa se define según la Ecuación 45. Asimismo, la media en la columna se determina mediante la media geométrica de las volatilidades en los extremos de la torre, esto se expresa en la Ecuación 46.

$$\alpha = \frac{y(1-x)}{x(1-y)} \quad \text{Ecuación 45}$$

$$\alpha_a = \sqrt{\alpha_{cabezas} \cdot \alpha_{colas}} \quad \text{Ecuación 46}$$

Los parámetros y resultados del cálculo de la eficiencia se presentan en la Tabla 43.

Tabla 43. Cálculo del número de etapas reales en la columna

Parámetro	Valor
Etapas ideales	12
μ_a , mPa.s	0,305
α_a	4,353
E_0 , %	46,99
Etapas reales	$25,54 \approx 26$

Por lo tanto, se determina que la columna contará con 26 etapas además de la caldera. Haciendo un cálculo proporcional, la alimentación deberá ser introducida en la etapa número 17.

$$etapa\ alimentación\ real = \frac{etapa\ alimentación\ ideal}{etapas\ ideales} \cdot etapas\ reales = \frac{8}{12} \cdot 26 \simeq 17$$

2.6. Diseño hidráulico

Una vez estimado el número real de platos necesarios para la columna de destilación, es posible realizar el dimensionamiento de la torre, con base en las condiciones hidráulicas que conduzcan a una operación óptima. Una etapa de contacto como requerimientos básicos tiene que: proporcionar un buen contacto entre fases, tener superficie y espaciado suficientes para mantener el arrastre y la caída de presión dentro de límites aceptables y, finalmente, tener un área suficiente de bajante para que el líquido circule libremente de un plato a otro (2).

2.6.1. Espaciado entre platos

El espacio que existe entre cada plato de la columna dependerá de su diámetro y de las condiciones de operación. Normalmente, para columnas de diámetros mayores a un metro, el espaciado entre platos se selecciona entre 0,3 y 0,6 metros. Como primera aproximación se empleará este último valor, que finalmente deberá ser revisado una vez completado el diseño detallado de los platos.

2.6.2. Selección del tipo de plato

Los platos más comunes en la destilación son aquellos de flujo cruzado. En estos el líquido se desplaza de forma paralela al plato, mientras que el vapor sube verticalmente. En la Figura 15 es posible observar un esquema típico de este tipo de flujo. En este el líquido desciende al plato inferior a través de una bajante lateral. Además, una parte del líquido queda retenido en cada plato mediante un rebosadero. Existen tres tipos principales de platos de flujo cruzado: perforados, de campanas de borboteo y de válvulas.

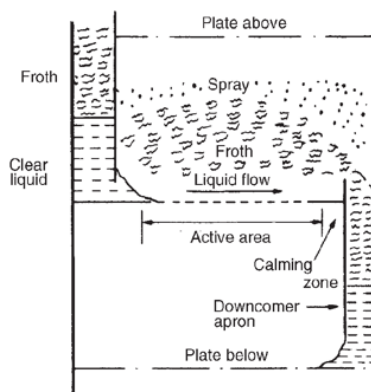


Figura 15. Típico plato de flujo cruzado perforado. Fuente: (2)

Para escoger el tipo de plato se consideran diversos factores. Con respecto al coste, los más económicos son los perforados. Además, el rango de operación en el que son capaces de trabajar de forma satisfactoria es un factor importante para una mayor flexibilidad en caso de fluctuaciones

en la producción, los más flexibles son los de campanas de borboteo, sin embargo, los platos perforados, si están correctamente diseñados, pueden operar en un rango de alrededor de 50% a 120% de la capacidad de diseño. En relación a la caída de presión, los perforados suelen dar los menores valores. En resumen, los platos perforados son los más económicos y satisfactorios para la mayoría de las aplicaciones, es por esto por lo que serán los utilizados en este diseño.

2.6.3. Rango de operación

Con el fin de conseguir un desempeño satisfactorio de la columna, se debe trabajar en un rango limitado de vapor y líquido. La Figura 16 presenta un diagrama típico del rendimiento de platos perforados en relación al flujo de ambas fases.

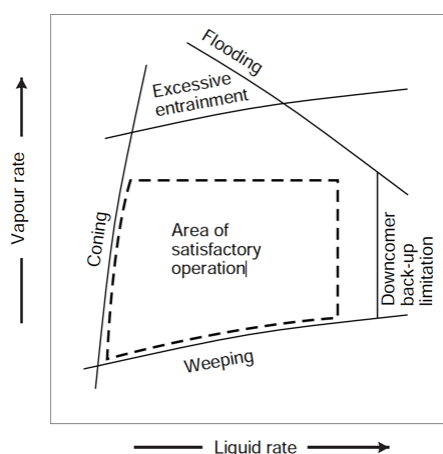


Figura 16. Diagrama del desempeño de platos perforados. Fuente: (2)

2.6.4. Caudales

Gracias a que los caudales de vapor y líquido, así como sus composiciones, variarán a lo largo de la columna, se hace necesario hacer el diseño de los platos encima y debajo de la etapa de alimentación por separado. El diseño se llevará a cabo tomando en consideración los caudales más altos de cada zona, pues esto conducirá al mayor diámetro necesario. Los datos de los flujos se presentan en la Tabla 44, incluyendo los caudales másicos totales de las corrientes.

Tabla 44. Caudales máximos de líquido y vapor en cada sección

Sección	L, kmol/s	V, kmol/s	L _w , kg/s	V _w , kg/s
Rectificación	0,67	1,37	21,48	43,71
Agotamiento	1,54	1,33	43,58	39,74

2.6.5. Propiedades físicas del sistema

Asimismo, se han de estimar las propiedades físicas de las corrientes en la parte superior e inferior de la torre. Para ello, se considerará una caída de presión por plato de 140 mm de agua. De esta manera, la caída de presión total en la columna se define según la Ecuación 47. En la Tabla 45 se especifican las condiciones estimadas en los extremos de la torre.

$$\Delta P = 140 \cdot 10^{-3} \cdot \rho_{H_2O} \cdot g \cdot N_{etapas} \quad \text{Ecuación 47}$$

Donde ΔP hace referencia a la caída de presión total (Pa), ρ_{H_2O} a la densidad del agua, que, para efectos de este cálculo, se tomará como 1000 kg/m^3 , g a la aceleración de la gravedad ($9,81 \text{ m/s}^2$), y N_{etapas} al número de etapas reales de la columna.

Tabla 45. Condiciones iniciales en la columna

Parámetro	Valor
$\Delta P, Pa$	35708,4
Presión cabezas, Pa	101325
Presión colas, Pa	137033,4
Temperatura cabezas, $^{\circ}C$	64,88
Temperatura colas, $^{\circ}C$	99,6

Una vez estimados estos valores, se procede a calcular las propiedades físicas necesarias para el diseño. Estas son, específicamente, la tensión superficial y las densidades de las corrientes líquidas y de vapor.

Las tensiones superficiales, σ , se recopilaron del software de simulación *Aspen HYSYS* a las condiciones de presión y temperatura correspondientes. Los valores se exponen en la Tabla 46.

Tabla 46. Tensiones superficiales. Fuente: *Aspen HYSYS*

Parámetro	Valor
σ colas, N/m	0,02373
σ cabezas, N/m	0,05859

La densidad líquida, por su parte, es estimada mediante la Ecuación 48 para cada compuesto puro.

$$\rho_{L,i} = \frac{C1}{C2 \left(1 + \left(1 - \frac{T}{C3} \right)^{C4} \right)} \cdot M \quad \text{Ecuación 48}$$

Donde $\rho_{L,i}$ representa la densidad de una especie pura líquida (kg/m^3), T la temperatura (K), M el peso molecular del componente (kg/kmol), y $C1$, $C2$, $C3$ y $C4$ los coeficientes de la ecuación, únicos para cada compuesto. En la Tabla 47 se recogen los valores de estos últimos para el metanol y el agua.

Tabla 47. Coeficientes para el cálculo de las densidades líquidas. Fuente: (6)

Compuesto	C1	C2	C3	C4
Metanol	2,288	0,269	512,64	0,2453
Agua	4,9669	0,278	647,13	0,1874

Por otro lado, la densidad del vapor se calcula asumiendo un comportamiento de gas ideal, por lo que se emplea la ley de los gases ideales, presentada en la Ecuación 49.

$$\rho_{V,i} = \frac{P \cdot M}{R \cdot T} \quad \text{Ecuación 49}$$

Donde $\rho_{V,i}$ es la densidad del vapor de la sustancia pura (kg/m^3), P la presión (Pa) y R la constante de los gases ideales, ($8,314 \text{ J/mol K}$).

Finalmente, para conocer la densidad global de cada corriente, se determina la media ponderada multiplicando la densidad de cada componente individual por su composición. Los resultados para cada sección se reflejan en la Tabla 48.

Tabla 48. Densidades de las corrientes en cada sección

Sección	$\rho_L, \text{kg/m}^3$	$\rho_V, \text{kg/m}^3$
Enriquecimiento	750,69	1,1523
Agotamiento	957,15	0,7989

2.6.6. Diámetro de la columna

El parámetro que condiciona la máxima velocidad de vapor en la columna es la inundación. Normalmente se operará a una velocidad que sea de un 70 a 90 por ciento de aquella que produzca inundación. Para este diseño se asumirá un valor inicial de 85%. La velocidad de inundación se puede estimar a partir de una correlación desarrollada por Fair, presentada en la Ecuación 50.

$$u_f = K_1 \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}} \quad \text{Ecuación 50}$$

Donde u_f es la velocidad del vapor que causa inundación (m/s) basada en la sección transversal neta de la columna, A_n , y K_1 es una constante obtenida de la Figura 17. Si la tensión superficial del líquido es distinta a $0,02 \text{ N/m}$, la constante K_1 ha de ser modificada multiplicando el valor obtenido de la gráfica por $\left(\frac{\sigma}{0,02}\right)^{0,2}$.

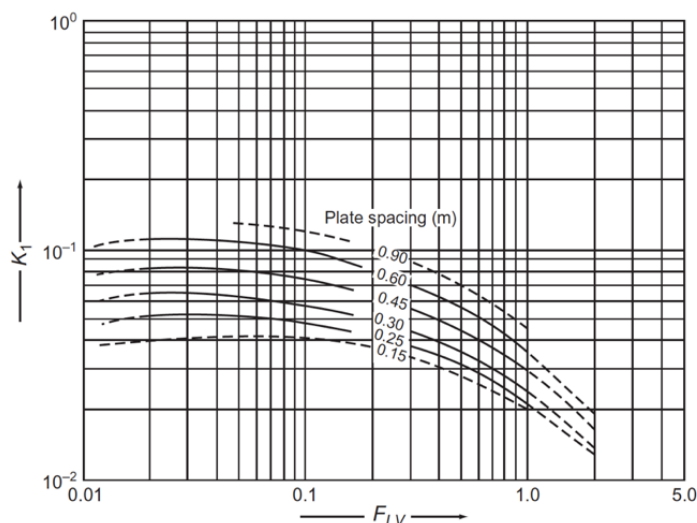


Figura 17. Velocidad de inundación en platos perforados. Fuente: (2)

Para esta figura es necesario conocer el valor del factor de flujo líquido-vapor F_{LV} , el cual está dado por la Ecuación 51.

$$F_{LV} = \frac{L_w}{V_w} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \quad \text{Ecuación 51}$$

Donde L_w y V_w son los caudales másicos del líquido y vapor (kg/s), respectivamente.

Para calcular el diámetro de la columna, D_C , se requiere un valor estimado del área neta de la columna, la cual se determina a partir del caudal volumétrico máximo de vapor, $Q_{V,máx}$. Como primera estimación se tomará la superficie de la bajante como un 12% del área total, A_c . De esta manera, el diámetro se calculará a partir del área de la circunferencia. Las ecuaciones empleadas son las presentadas a continuación y, los resultados, por otro lado, se encuentran en la Tabla 49.

$$u_v = \%inundación \cdot u_f \quad \text{Ecuación 52}$$

$$Q_{V,máx} = \frac{V_w}{\rho_V} \quad \text{Ecuación 53}$$

$$A_n = \frac{Q_{V,máx}}{u_v} \quad \text{Ecuación 54}$$

$$A_c = \frac{A_n}{1 - 0,12} \quad \text{Ecuación 55}$$

$$D_C = \sqrt{\frac{4 A_c}{\pi}} \quad \text{Ecuación 56}$$

Tabla 49. Resultados del cálculo del diámetro de la columna

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
F_{LV}	0,019	0,032
K_1	0,116	0,116
K_1 corregida	0,120	0,144
$u_f, m/s$	3,06	4,98
$u_v, m/s$	2,60	4,23
$Q_{V,máx}, m^3/s$	37,93	49,75
A_n, m^2	14,58	11,76
A_c, m^2	16,56	13,37
D_C, m	4,59	4,13

Los diámetros difieren en menos de un 20%, por lo que se diseñará la columna a partir del diámetro de mayor valor, es decir, el de la sección de enriquecimiento. El diámetro de la columna será, entonces, de 4,6 metros.

2.6.7. Verificación del arrastre

El caudal de vapor es uno de los factores más importantes a la hora de determinar el diámetro de la columna. Para una operación eficiente, la velocidad del vapor ha de ser menor a aquella que cause un arrastre de líquido excesivo o una caída de presión muy alta. Es por esta razón por lo que se hace necesario verificar que el arrastre fraccional, ψ (kg/kg de flujo líquido), tenga un valor, como máximo, de 0,1. Este se puede estimar mediante la correlación dada por Fair para platos perforados, representada en la Figura 18, la cual está en función de F_{LV} y el %inundación.

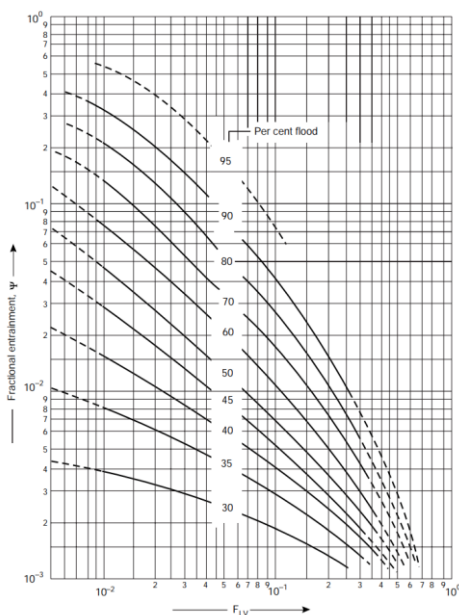


Figura 18. Correlación de Fair de arrastre para platos perforados. Fuente: (2)

El %inundación se obtiene para cada sección a partir de la Ecuación 52. Los resultados se recogen en la Tabla 50.

Tabla 50. Resultados preliminares del arrastre

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
%inundación	84,7	68,4
ψ	0,16	0,045

Es posible observar que el arrastre fraccional en la sección de enriquecimiento es superior al recomendado de 0,1. De esta manera, es necesario aumentar el diámetro de la columna para evitar que este fenómeno ocurra. El nuevo diámetro D_c será de 4,8 metros. A partir de este nuevo valor se recalculan los parámetros y se muestran los resultados obtenidos en la Tabla 51.

Tabla 51. Resultados del arrastre en la columna

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
%inundación	77,8	62,8
ψ	0,1	0,032

En este caso, en la zona superior de la columna, el arrastre es igual al límite recomendado. Al ser, como bien lo explica la palabra, solo una recomendación, y con el fin de no comprometer la eficiencia de la columna en términos de inundación, ya que esta disminuye al aumentar el diámetro, se considera que el diámetro de 4,8 metros es adecuado y será el valor con el que se llevará a cabo el diseño de ahora en adelante.

2.6.8. Selección del patrón de flujo

Este parámetro dependerá del caudal de líquido y del diámetro de la columna. En la Figura 19 se presenta una gráfica que sirve de guía para la elección del tipo de plato.

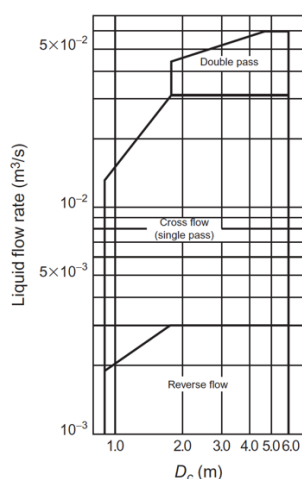


Figura 19. Selección del patrón de flujo. Fuente: (2)

El caudal de líquido máximo en cada sección se determina a partir de la Ecuación 57. Los datos obtenidos se muestran en la Tabla 52.

$$Q_{L,m\acute{a}x} = \frac{L_w}{\rho_L} \quad \text{Ecuación 57}$$

Tabla 52. Caudal máximo de líquido en cada sección

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
$Q_{L,m\acute{a}x}, m^3/s$	0,029	0,045

Según la Figura 19, en la zona superior de la columna el patrón debería ser flujo cruzado y paso simple, mientras que en la inferior se sugiere paso doble. Con el fin de construir una columna de estructura uniforme, se establece que todos los platos de la torre se instalarán de paso simple, pues es el recomendado para la sección con mayor número de etapas. Además, este tipo de platos es el más versátil, económico y de mayor disponibilidad en el mercado, sin dejar de lado la mayor cantidad de recursos con información referida a un diseño óptimo de este tipo de platos.

2.6.9. Estructura del plato

Las definiciones de las distintas áreas necesarias para el diseño del equipo se dan a continuación:

- A_c es el área de la sección transversal total de la columna.
- A_d es la sección transversal de la bajante, asumida como un 12% del A_c .
- A_n es el área neta disponible para la separación vapor-líquido, se considera que es $A_c - A_d$.
- A_a es el área activa o de borboteo, para platos de paso simple es igual a $A_c - 2 A_d$.
- A_h es el área de los agujeros activos del plato, esta se suele tomar como un 10% del área activa. En este caso, al operar con un caudal de vapor elevado, en pos de una disminución de la caída de presión en la columna, se asumirá un valor inicial de 13%.
- A_p es el área perforada total, representada por la zona donde se encuentran los agujeros incluyendo los espacios entre ellos.

De la misma forma, se deben definir las dimensiones del rebosadero. Su altura, h_w , determina el volumen de líquido en el plato y es un factor importante en la eficiencia del plato, a mayor altura la eficiencia incrementará, a expensas de una mayor caída de presión. El valor inicial recomendado es de 40 a 50 mm, en este diseño se toma de 40 mm. Por otro lado, la longitud del rebosadero, l_w , es fijada por el área de la bajante. Al haber seleccionado un área A_d de 12% A_c , la longitud se determina como $0,77 D_c$.

Asimismo, el tamaño de los orificios, d_h , varía desde 2,5 hasta 12 mm, siendo 5 mm el diámetro preferido y el escogido para la columna en cuestión. Dependiendo del material, los platos tendrán un espesor diferente, en el apartado 2.7 *Selección del material de construcción* se explica que la columna de destilación estará construida con acero inoxidable, por lo que el espesor de los platos será de 3 mm, ya que es el valor típico para este material.

En la Tabla 53 se recopilan los valores de la estructura del plato.

Tabla 53. Parámetros de estructura del plato

Parámetro	Valor
D_c, m	4,8
A_c, m^2	18,10
A_d, m^2	2,17
A_n, m^2	15,92
A_a, m^2	13,75
A_h, m^2	1,79
h_w, mm	40
l_w, m	3,696
d_h, mm	5
Espesor del plato, mm	3

2.6.10. Comprobación de la velocidad de goteo

El límite inferior del rango operativo ocurre cuando la fuga de líquido a través de los orificios se vuelve excesiva. Esto se conoce como el punto de goteo. La velocidad de vapor a la que se produce

el goteo es el valor mínimo que asegura una operación estable. El área de los agujeros debe seleccionarse de manera que, aun operando con el caudal mínimo de vapor, la operación se encuentra por encima del punto de goteo. La correlación propuesta por Eduljee, representada por la Ecuación 58, será la utilizada para determinar este punto limitante.

$$u_{h,goteo} = \frac{K_2 - 0,9 (25,4 - d_h)}{(\rho_V)^{0,5}} \quad \text{Ecuación 58}$$

Donde u_h hace referencia a la velocidad mínima de vapor a través de los orificios (m/s) y K_2 a una constante dependiente de la profundidad del líquido en el plato, obtenida de la Figura 20.

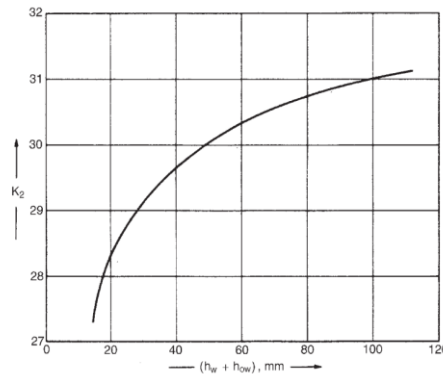


Figura 20. Correlación del punto de goteo. Fuente: (2)

La profundidad del líquido es igual a suma de la altura del rebosadero, h_w , y la altura del líquido sobre el rebosadero, h_{ow} . Esta última es estimada empleando la fórmula presentada en la Ecuación 59. El valor de h_{ow} deberá ser de al menos 10 mm considerando el caudal mínimo de líquido, con el fin de asegurar un flujo de líquido uniforme a lo largo del rebosadero.

$$h_{ow} = 750 \left(\frac{L_w}{\rho_V l_w} \right)^{2/3} \quad \text{Ecuación 59}$$

Cabe destacar que el mínimo caudal en la columna se considera un 70% del máximo, tanto en el caso del líquido como del vapor. Los parámetros de la verificación de la velocidad de goteo son presentados en la Tabla 54.

Tabla 54. Comprobación del punto de goteo

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
$L_{w,m\acute{a}x}, \text{ kg/s}$	21,48	43,58
$L_{w,m\acute{i}n}, \text{ kg/s}$	15,03	30,51
$h_{ow,m\acute{a}x}, \text{ mm}$	29,35	40,01
$h_{ow,m\acute{i}n}, \text{ mm}$	23,14	31,54
$h_w + h_{ow}, (\text{a } L_{w,m\acute{i}n}), \text{ mm}$	63,14	71,54
K_2	30,30	30,55
$u_{h,goteo}, \text{ m/s}$	11,12	13,64
$Q_{V,m\acute{i}n}, \text{ m}^3/\text{s}$	26,55	34,82
$u_{h,real}, \text{ m/s}$	14,85	19,48

Es posible comprobar que todas las alturas de líquido sobre el rebosadero sobrepasan los 10 mm mínimos recomendados. Del mismo modo, se ha confirmado que la velocidad del vapor mínima real en la columna ($u_{h,real}$, calculada a partir del área de los agujeros) es mayor que el mínimo valor que garantiza la prevención del goteo en ambas secciones de la columna.

2.6.11. Caída de presión

La caída de presión en los platos es un parámetro de diseño significativo. Esta se genera por dos fuentes principales: el caudal de vapor a través de los orificios y la carga estática del líquido en el plato. Para predecir la caída de presión total se suele emplear un modelo aditivo en el cual la caída total viene dada por la suma de la calculada para el flujo de vapor a través del plato seco (caída de presión en el plato seco, h_d), la carga del líquido en el plato ($h_w + h_{ow}$) y un término que compensa otras fuentes menores de caída de presión, llamadas pérdidas residuales, h_r .

Tal y como se hizo en la estimación inicial, la caída de presión se suele expresar en términos de milímetros de líquido. Para transformarla a unidades internacionales se emplea la Ecuación 60.

$$\Delta P_t = h_t \cdot 10^{-3} g \rho_L \quad \text{Ecuación 60}$$

Donde ΔP_t es la caída de presión total en el plato (Pa) y h_t es la carga total en mm de líquido.

Caída de presión en el plato seco

Es posible estimar este parámetro a partir de la Ecuación 61, donde u_h es la velocidad máxima de vapor a través de los orificios (m/s) y C_0 es el coeficiente del orificio, una función del espesor del plato, del diámetro de cada orificio y de la relación del área de los agujeros al área perforada, la cual se puede asumir igual al área activa para esta gráfica. Este se obtiene de la Figura 21.

$$h_d = 51 \left(\frac{u_h}{C_0} \right)^2 \frac{\rho_V}{\rho_L} \quad \text{Ecuación 61}$$

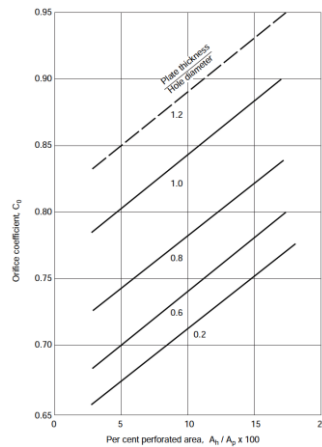


Figura 21. Coeficiente de descarga, platos perforados. Fuente: (2)

Carga residual

Esta se estima a partir de una ecuación propuesta por Hunt *et al*, la cual se presenta a continuación:

$$h_r = \frac{12,5 \cdot 1000}{\rho_L} \quad \text{Ecuación 62}$$

Entonces, la carga total en el plato es determinada según la Ecuación 63. En la Tabla 55 se especifican los parámetros resultantes de este apartado.

$$h_t = h_d + (h_w + h_{ow}) + h_r \quad \text{Ecuación 63}$$

Tabla 55. Caída de presión por plato

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
Espesor plato/ d_h		0,6
$A_h/A_p \cong A_h/A_a$, %		13
C_0		0,76
$Q_{V,máx}$, m^3/s	37,93	49,75
u_h , m/s	21,21	27,83
h_d , mm	61,00	57,07
h_r , mm	16,65	13,06
h_t , mm	140,79	141,67
ΔP_t , Pa	1036,82	1330,18

Los valores obtenidos de aproximadamente 140 mm de carga por plato se consideran aceptables según la literatura consultada (2).

Además, la caída de presión total en la columna se estima de acuerdo con la siguiente expresión:

$$\Delta P_{columna} = \Delta P_{t,enriq} \cdot N_{etapas\ enriq} + \Delta P_{t,agot} \cdot N_{etapas\ agot} \quad \text{Ecuación 64}$$

Inicialmente fue asumida una caída de presión de 140 mm de agua en cada etapa, lo que resultaba en una presión en colas de 1,37 bar. Luego de este cálculo, se conoce que realmente a esta le corresponde un valor de 1,31 bar.

Asimismo, la alimentación deberá ingresar a la columna a una presión mayor a la atmosférica, con el fin de compensar la caída de presión dentro del equipo. Es posible determinar que, en la etapa de entrada de la corriente de alimentación, la presión es de 1,19 bar, por lo que será este el valor de presión de la alimentación. Se conoce que los datos de equilibrio no experimentan variaciones significativas con un ligero aumento de presión, por consiguiente, es asumido que los valores calculados anteriormente a presión atmosférica constante son correctos.

2.6.12. Verificación del retorno de la bajante

El área de la bajante y el espaciado entre platos deben asegurar que el nivel de líquido se encuentre bien por debajo del rebosadero del plato superior. El retorno del líquido en la bajante es causado por la caída de presión en el plato y la resistencia al flujo en la bajante misma. Esto se puede apreciar en la Figura 22. En términos del líquido, el retorno se define por la Ecuación 65.

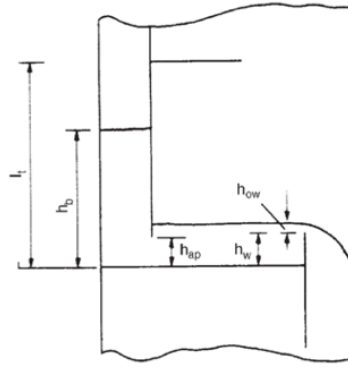


Figura 22. Retorno de la bajante. Fuente: (2)

$$h_b = h_t + (h_w + h_{ow}) + h_{dc} \quad \text{Ecuación 65}$$

Donde h_b es el retorno de la bajante, medido desde el plato inferior (mm) y h_{dc} es la pérdida de carga en la bajante (mm). Este último parámetro se puede estimar empleando la Ecuación 66, establecida por Cicalese *et al.*

$$h_{dc} = 166 \left(\frac{L_{wd}}{\rho_L A_m} \right)^2 \quad \text{Ecuación 66}$$

Donde L_{wd} es el flujo de líquido en la bajante (será tomado como el flujo máximo en la columna) (kg/s) y A_m es el valor menor entre el área de la bajante, A_d , y el área de despeje debajo de la bajante, A_{ap} (m²). A_{ap} viene dada por:

$$A_{ap} = h_{ap} l_w \quad \text{Ecuación 67}$$

h_{ap} se observa en la Figura 22 (mm). Esta altura se suele establecer de 5 a 10 mm por debajo de la altura del rebosadero. En este caso, se tomará el valor de 10 mm.

$$h_{ap} = h_w - 10 \text{ mm} \quad \text{Ecuación 68}$$

Para un diseño seguro, h_b ha de tener un valor que no exceda la mitad del espaciado entre platos, l_t , para evitar que se produzca inundación. Esto queda representado por la siguiente expresión:

$$h_b \nlessgtr 0,5 (l_t + h_w) \quad \text{Ecuación 69}$$

Los resultados para el mayor caudal de líquido se exponen en la Tabla 56 mostrada a continuación. En ella se comprueba que el retorno de la bajante tiene un valor muy inferior al límite establecido.

Tabla 56. Cálculo del retorno de la bajante

Parámetro	Valor
$h_{ap}, \text{ mm}$	30
$A_{ap}, \text{ m}^2$	0,11
$A_d, \text{ m}^2$	2,17
$h_{dc}, \text{ mm}$	28,00
$h_b, \text{ mm}$	241,20
$0,5 (l_t + h_w), \text{ mm}$	320

2.6.13. Comprobación del tiempo de residencia

El tiempo de residencia en cada plato debe permitir la correcta separación entre el vapor y el líquido para evitar que el este arrastre grandes cantidades de vapor consigo. Un valor de al menos 3 segundos suele ser el recomendado. Este es determinado mediante la Ecuación 70.

$$t_r = \frac{A_d h_b \rho_L}{L_{wd}} \quad \text{Ecuación 70}$$

Los resultados se revelan en la Tabla 57, donde se verifica que en ambas secciones de la columna se consigue un tiempo de residencia superior al mínimo recomendado.

Tabla 57. Tiempos de residencia en la columna

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
t_r, s	16,32	11,50

2.6.14. Detalles del plato

El área del plato disponible para las perforaciones se verá reducida por la obstrucción causada por estructuras incorporadas en la columna, tales como anillos de soporte y vigas. Además, las zonas de calma también reducen el espacio para el número de agujeros. Estas últimas son partes no perforadas del plato, ubicadas en los lados de entrada y salida del líquido. Para columnas de diámetro mayor a 1,5 metros se sugiere una zona de calma de 100 mm de ancho, por lo que es el valor elegido. Por otro lado, el grosor del anillo de soporte, l_a , suele ser de 50 a 75 mm, y este no deberá extenderse hasta el bajante. Se selecciona una anchura de 70 mm para esta columna.

Es posible calcular el área sin perforar a partir de la geometría del plato. La relación entre la longitud de cuerda del rebosadero, la altura del arco y el ángulo central se expone en la Figura 23.

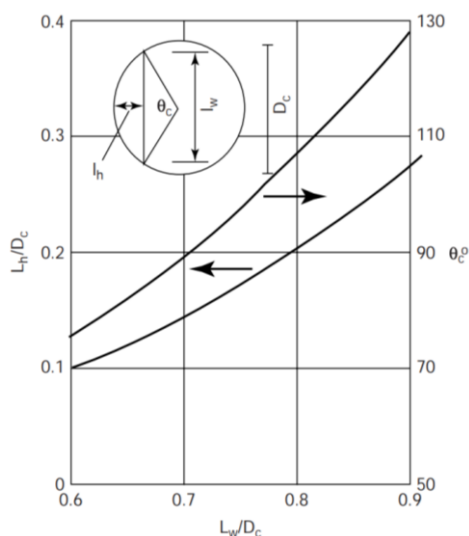


Figura 23. Relación geométrica de la bajante. Fuente: (2)

A continuación, en la Tabla 58, se especifican los parámetros obtenidos de la figura anterior.

Tabla 58. Altura del arco y ángulo central de la bajante

Parámetro	Valor
l_h, m	0,869
$\theta_c, ^\circ$	100

A partir de ángulo determinado, θ_c , se puede calcular el ángulo subtendido por el borde no perforado, $\theta_s = 180^\circ - \theta_c = 80^\circ$. Es posible apreciarlo en la Figura 24.

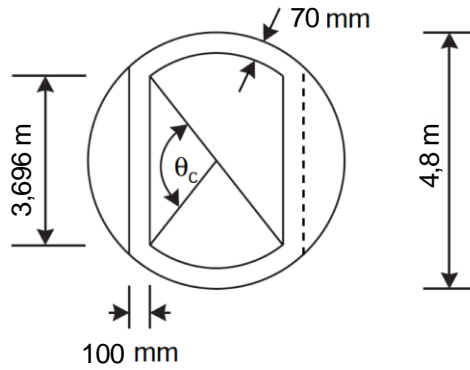


Figura 24. Estructura del plato y características de la tira sin perforar

Asimismo, se calcula la longitud media de los bordes no perforados, l_{np} de acuerdo con la Ecuación 71, y, seguidamente, se obtiene el área de estas a partir de la Ecuación 72.

$$l_{np} = (D_c - l_a) \pi \cdot \frac{\theta_s}{180} = 6,60 \text{ m} \quad \text{Ecuación 71}$$

$$A_{np} = l_{np} \cdot l_a = 0,462 \text{ m}^2 \quad \text{Ecuación 72}$$

Del mismo modo, se determina la longitud media de las zonas de calma, l_{zc} , mediante la Ecuación 73 y su superficie total, A_{zc} , multiplicando l_{zc} por dos veces el grosor recomendado de 100 mm.

$$l_{zc} = l_w + l_a = 3,766 \text{ m} \quad \text{Ecuación 73}$$

$$A_{zc} = 2 \cdot l_{zc} \cdot 100 \times 10^{-3} = 0,753 \text{ m}^2 \quad \text{Ecuación 74}$$

De esta forma, es posible determinar el área total disponible para las perforaciones restando al área activa las dos áreas calculadas en este apartado:

$$A_p = A_a - A_{np} - A_{zc} = 12,537 \text{ m}^2 \quad \text{Ecuación 75}$$

Finalmente, es necesario conocer la disposición, comúnmente conocida como *pitch*, de los agujeros, esta se mide por la distancia entre los centros de los orificios. Su valor deberá encontrarse en el rango típico de entre 2,5 y 4 veces el diámetro de los agujeros, y no será nunca inferior a 2 diámetros. Los orificios se distribuyen siguiendo un patrón cuadrado o triangular, siendo este último el preferido y seleccionado en esta columna. La Ecuación 76 presenta una relación entre el valor del *pitch*, l_p , y el área de las perforaciones.

$$\frac{A_h}{A_p} = 0,9 \left(\frac{d_h}{l_p} \right)^2 \quad \text{Ecuación 76}$$

El valor de los parámetros necesarios para esta ecuación y el del *pitch* son establecidos en la Tabla 59. En ella se observa que este último se encuentra dentro del rango establecido.

Tabla 59. Cálculo del *pitch* de los orificios en el plato

Parámetro	Valor
A_h/A_p	0,14
l_p/d_h	2,51
l_p, mm	12,56

Y, por último, se determina el número de agujeros totales a partir del área de un orificio y el área perforada, A_h . Los resultados son expuestos en la Tabla 60.

Tabla 60. Cálculo del número de orificios por plato

Parámetro	Valor
Área de un agujero, m^2	1,964 E-05
Número de agujeros	91054

2.7. Selección del material de construcción

Al momento de escoger el material de construcción para los equipos de un proceso industrial, se han de tener en consideración numerosos aspectos. Sin embargo, para plantas químicas, el que probablemente sea el factor fundamental es la habilidad para resistir la corrosión. Igualmente, será necesario tomar en cuenta otros elementos, tales como las condiciones de operación y la resistencia a las cargas a las que estará sometido el equipo.

En relación al último parámetro mencionado, los recipientes a presión son siempre diseñados, por motivos de seguridad, según un criterio de fallo, ya sea que se deforme o que vierta antes de romper. En el caso de recipientes de grandes dimensiones, un diseño seguro es conseguido certificando que este tolere una grieta de longitud igual al espesor de la pared del recipiente presurizado, evitando una fractura rápida. A esto se le denomina verter antes de romper, pues la fuga será detectada fácilmente y liberará la presión de forma gradual y segura.

La metodología de Ashby permite llevar a cabo una selección acertada del material de construcción de los recipientes con base en los denominados índices de material. Estos se definen como una propiedad o grupo de propiedades que maximizan el desempeño de un diseño dado, es decir, proveen criterios de excelencia que permiten ordenar a los materiales según su habilidad para actuar correctamente en cierta aplicación.

Para hacer uso de esta metodología, se deberán tener en cuenta cuatro preguntas básicas: cuál es la función del recipiente, qué restricciones existen en el sistema, cuál es el objetivo del diseño y,

finalmente, de qué variables se dispone para conseguir dicho objetivo. En la Tabla 61 se responde de forma abreviada a estas interrogantes.

Tabla 61. Requerimientos de diseño para recipientes a presión. Fuente: (7)

Función	Recipiente a presión (contener la presión de forma segura)
Restricciones	Diámetro especificado del recipiente y aspectos económicos
Objetivo	Maximizar la seguridad empleando el criterio verter antes de romper
Variables libres	Selección del material

De esta manera, se diseña el recipiente de manera que la tensión a la presión de operación sea menor que el límite elástico de las paredes, esto deriva en el índice de material M_1 . Al mismo tiempo, se conseguirá una mayor seguridad si se exige que la grieta formada no se propague, incluso cuando esta tensión alcance el límite elástico, lo que conduce a un segundo índice, M_2 . Sin embargo, es poco práctico emplear exámenes radiográficos en los recipientes en todo momento, por consiguiente, se ha propuesto asegurar aún más el diseño al establecer que la grieta sea lo suficientemente grande como para penetrar ambas paredes del recipiente, causando una fuga que se pueda detectar. Este último criterio conlleva al índice de material M_3 , el cual se corresponde con el criterio mencionado anteriormente de verter antes de romper. Los materiales que maximicen este índice serán los más indicados para un recipiente seguro.

Del mismo modo, un recipiente a presión óptimo deberá tener paredes relativamente delgadas con la finalidad de que sea lo más ligero posible, así como lo más económico en cuanto a la cantidad de material requerido. Es por esto por lo que se desea maximizar otro índice de material, M_4 , el cual se trata del límite elástico, ya que el material con el mayor valor resultará en la pared más delgada.

Consecuentemente, los índices que serán empleados para la selección del material de la columna de destilación son M_3 y M_4 . M_3 es derivado de las ecuaciones fundamentales para el cálculo de las cargas en el recipiente, y se puede representar como la Ecuación 77, donde K_{IC} es la tenacidad a la fractura en deformación plana ($\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$) y σ_f es el límite elástico del material (MPa).

$$M_3 = \frac{K_{IC}^2}{\sigma_f} \quad \text{Ecuación 77}$$

Para facilitar la búsqueda de materiales apropiados según estos índices, Ashby desarrolló gráficos en los que representó una propiedad frente a otra y detalló una especie de mapa con múltiples campos correspondientes a diversas clases de materiales y a materiales individuales. Estos mapas son realmente útiles, pues condensan grandes cantidades de información en figuras fácilmente comprensibles. Uno de estos gráficos se exhibe en la Figura 25, donde se encuentra representado K_{IC} frente a σ_f . Los índices M_3 y M_4 aparecen como rectas de pendiente $1/2$ y verticales, respectivamente. Por ejemplo, una recta que represente el índice M_3 corresponde a un valor

constante de dicho índice, por lo que los materiales sobre los que se encuentre esta recta tendrán un comportamiento similar en lo referente al criterio verter antes de romper. Aquellos materiales localizados por encima de la recta tendrán un mejor desempeño. Del mismo modo, mientras más a la derecha del mapa se encuentre el material, mayor será su índice M_4 (7).

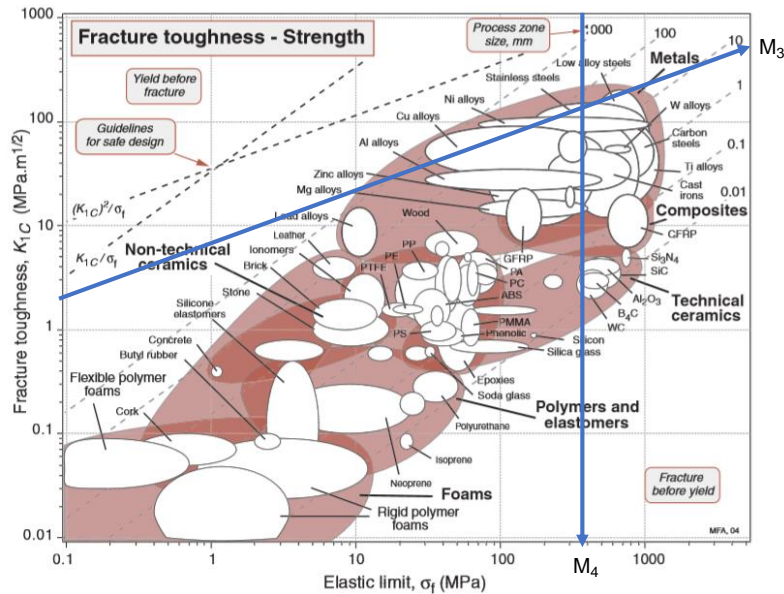


Figura 25. Tenacidad a la fractura vs. límite elástico. Fuente: (7)

En la Figura 25 se representaron las rectas correspondientes a ambos índices de material M_3 y M_4 , y, al maximizarlos se observa que los materiales con un mejor desempeño son metales, específicamente, los aceros inoxidable y los aceros de baja aleación. De esta forma, estos son seleccionados como alternativas para construir el equipo.

Como fue expuesto al inicio de este apartado, la corrosión es un factor fundamental en la selección del material de construcción de un recipiente industrial. Esta puede ser causada por una variedad de elementos, y se deben tener en consideración factores como la temperatura, la cual afecta la velocidad de corrosión y las propiedades mecánicas del material, la presión, el pH, la presencia de trazas de impurezas, entre otras. La bibliografía (2) incluye unas tablas de corrosión, en las cuales se ha tabulado la resistencia de materiales comunes en la industria a la corrosión provocada por un rango diverso de compuestos químicos. En estas se especifica que los tres componentes presentes en la columna, metanol, agua y las trazas de propilenglicol, son compatibles con los aceros más comunes. Sin embargo, puntualizan que solo deben ser usadas como guía, y que se deberá confirmar con los fabricantes.

De esta manera, se hace necesario verificar con datos de alguna empresa especialista que trabaje con dichos materiales. La mayoría proporciona tablas de compatibilidad química con una clasificación según letras, A, B, C o D. Siendo A excelente compatibilidad y D no recomendable. En la Tabla 62 se muestra un resumen de los metales considerados para la columna y las sustancias

químicas presentes. A partir de esta se conoce que el acero al carbono no es compatible con el agua, por lo que se descarta como opción, quedando finalmente dos tipos de acero inoxidable, 304 y 316.

Tabla 62. Compatibilidad química de materiales. Fuente: (8)

Sustancia	Acero al carbono	Acero inoxidable 304	Acero inoxidable 316
Metanol	A	A	A
Agua	D	A	A
Propilenglicol	A	B	B

En el ámbito económico, el precio de los metales y sus aleaciones fluctúa de forma bastante amplia, sin embargo, es posible emplearlos como un indicativo del orden de magnitud y la proporción entre distintos tipos de aceros. En la Tabla 63 se exponen los costes de diversos aceros proporcionados por la literatura (2).

Tabla 63. Coste básico de metales. Fuente: (2)

Metal	US \$/tonelada
Acero al carbono	500
Acero inoxidable austenítico:	
304	2400
316	3200

No obstante, la cantidad empleada de material dependerá de su densidad y tensión de diseño, y estas deben tomarse en cuenta al comparar los distintos costes. Es por esta razón por la que han sido desarrollados factores que clasifiquen los materiales por su precio relativo, considerando los aspectos anteriormente mencionados. De estos se deduce que, materiales con tensiones de diseño mayores, tales como los aceros inoxidables pueden ser empleados de forma más eficiente que los aceros al carbono, por ejemplo.

Finalmente, la decisión se halla entre los dos tipos de acero inoxidable: el 304 y el 316. El acero de tipo 304, también llamado acero inoxidable 18/8, es el acero inoxidable más usado. Contiene la cantidad mínima de cromo y níquel que permite una estructura austenítica estable. Por su lado, el de tipo 316, contiene en su aleación molibdeno para incrementar la resistencia a la corrosión en condiciones reductoras, tales como en disoluciones de ácido sulfúrico o de cloruros.

Ya que este último no es el caso, se decide emplear el acero 304 como el material de construcción de la columna de destilación, siendo correctamente resistente a la corrosión y compatible con todas las sustancias presentes, además de ser mucho más económico que el 316.

2.8. Diseño mecánico

El diseño mecánico de la columna de destilación T-304 se llevará a cabo de acuerdo con el Código Internacional ASME Boiler and Pressure Vessel Code, sección VIII, División 1. A pesar de operar

a una presión cercana a la atmosférica, por motivos de seguridad, el equipo será diseñado como un recipiente a presión de orientación vertical.

2.8.1. Temperatura de diseño

La tensión máxima de diseño de un material dependerá de la temperatura. La temperatura de diseño a la que debe ser evaluada la tensión máxima será tomada como la temperatura máxima de operación del equipo, con una tolerancia en caso de que ocurra cualquier acontecimiento impredecible. El código ASME determina que esta deberá ser de 50 grados Fahrenheit adicionales. De esta forma, la temperatura máxima de operación de la columna es de 99,6 °C, y es aproximada hasta 100 °C, lo que es igual a 212 °F. A continuación, es calculada la de diseño.

$$T_{diseño} = 212 + 50 = 262 \text{ °F. Convirtiéndolo a centígrados: } T_{diseño} = 127,78 \text{ °C}$$

2.8.2. Presión de diseño

Un recipiente deberá ser diseñado para aguantar la máxima presión a la que pueda ser sometido durante la operación. Para recipientes bajo presión interna, con el fin de asegurar el desempeño correcto en el caso de que se produzcan perturbaciones, se selecciona una sobrepresión del 10% sobre la mayor presión manométrica de operación, o bien esta se aumenta en 25 psi (172369 Pa), la opción que arroje el resultado más alto será la definitiva.

La presión más alta de trabajo en la columna es de 1,31 bar (131000 Pa). En términos relativos serían 29675 Pa. A continuación, se calculan ambas alternativas y se observa que la presión de diseño mayor se consigue al sumar los 25 psi, por lo que es la seleccionada.

$$P_{diseño} = 29675 \cdot 1,1 = 32642,5 \text{ Pa}$$

$$P_{diseño} = 29675 + 172369 = 202044 \text{ Pa}$$

2.8.3. Máximo esfuerzo permisible

Para efectos de diseño se hace necesario decidir un valor de la máxima tensión permisible para el material de construcción. En la Tabla 64 se presentan valores típicos para el acero inoxidable 304 según la temperatura de diseño. A partir de esta se conoce que la tensión de diseño para la columna es de 130 MPa, pues se escoge el de temperatura igual o inmediatamente superior a la de diseño, en este caso, 150 °C.

Tabla 64. Esfuerzos de diseño típicos para el acero 304. Fuente: (2)

Material	Tensión de rotura, <i>MPa</i>	Tensión de diseño a la temperatura (°C), <i>MPa</i>					
		0 a 50	100	150	200	250	300
Acero inoxidable 18Cr/8Ni (304)	510	165	145	130	115	110	105

2.8.4. Espesor mínimo de carcasa

Las paredes del recipiente han de tener un espesor mínimo que asegure la rigidez necesaria para soportar las cargas a las que es sometido. Según el código ASME, el espesor mínimo será el mayor de los calculados para la tensión radial y el esfuerzo longitudinal, los cuales se determinan según las ecuaciones 78 y 79, respectivamente.

$$t = \frac{P_i D_i}{2 S E - 1,2 P_i} \quad \text{Ecuación 78}$$

$$t = \frac{P_i D_i}{4 S E - 0,8 P_i} \quad \text{Ecuación 79}$$

Donde t es el espesor mínimo requerido (m), P_i la presión interna de diseño (Pa), D_i el diámetro interno del recipiente (m), S el máximo esfuerzo permisible (Pa) y E la eficacia de la unión soldada.

La fuerza de una unión soldada dependerá del tipo de unión y de la eficacia de la soldadura. Estas son verificadas a lo largo del tiempo mediante inspección visual y pruebas radiográficas no destructivas. La menor fuerza que pueda tener una unión soldada se suele compensar con un factor de eficacia de junta, E , el cual es multiplicado por el esfuerzo máximo permisible, y dependerá del tipo de junta y de la calidad de la inspección radiográfica realizada. Un valor de 1 de este factor implicará una radiografía completa, lo que afectará el coste de inspecciones y reparaciones una vez operativo el equipo. Por el contrario, valores menores de E conllevarán a espesores mayores de carcasa, y mayor coste de materiales de construcción. La Tabla 65 presenta consideraciones típicas para la selección de este factor. Para este diseño se elige un tipo de unión de doble soldadura con radiografía puntual, con un E de 0,85, pues se considera un valor que proporcionará resultados equilibrados en términos económicos.

Tabla 65. Eficiencia de unión soldada. Fuente: (2)

Tipo de unión	Grado de radiografía		
	Total	Puntual	Ninguna
Doble soldadura o equivalente	1	0,85	0,7
Soldadura simple	0,9	0,8	0,65

De los espesores resultantes, el mayor es el radial, con un valor de 4,39 mm, frente al longitudinal, de 2,19 mm. A este espesor se le deberá adicionar una tolerancia por corrosión, sin embargo, determinar un dato exacto es sumamente complicado, por lo que, con base en la experiencia, la bibliografía (2) recomienda que cuando no se esperan condiciones severas de corrosión, se sumarán 2 mm al espesor calculado para el recipiente.

No obstante, en heurísticas basadas en la experiencia (9) se indica que, para una rigidez acertada, los recipientes de diámetro mayor que 1,52 metros deberán tener un espesor mínimo de 11,7 mm.

Es por esta razón por la que se selecciona este valor como el espesor mínimo, al cual se le añadirán los milímetros adicionales por corrosión, resultando, entonces, en un espesor de 13,7 mm.

2.8.5. Cabezales de la columna

Cada extremo de la columna debe ser cerrado con un cabezal. Existen múltiples formas de cabezales, siendo los más utilizados los denominados abombados: el hemisférico, el elíptico y el toriesférico. Es posible apreciarlos en la Figura 26. El cabezal toriesférico es el más común cuando se trabaja con presiones de hasta 15 bar. Por encima de esta presión, el cabezal más económico será usualmente el elíptico. El hemisférico, por otro lado, es el tipo de cabezal más fuerte, apropiado para altas presiones, sin embargo, su coste de fabricación es considerablemente elevado en comparación con el toriesférico (2).

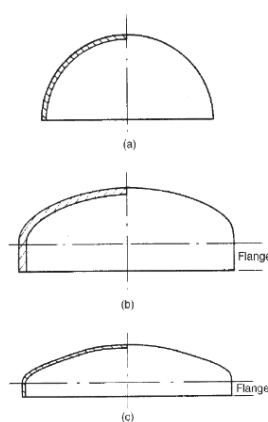


Figura 26. Tipos de cabezales abombados: a) hemisférico, b) elíptico, c) toriesférico. Fuente: (2)

El cálculo de los espesores para cada tipo de cabezal se lleva a cabo según las ecuaciones mostradas a continuación:

$$t_{toriesférico} = \frac{0,885 P_i R_c}{S E - 0,1 P_i} \quad \text{Ecuación 80}$$

$$t_{elíptico} = \frac{P_i D_i}{2 S E - 0,2 P_i} \quad \text{Ecuación 81}$$

$$t_{hemisférico} = \frac{P_i D_i}{4 S E - 0,4 P_i} \quad \text{Ecuación 82}$$

Donde R_c hace referencia al radio de la corona del cabezal, el cual suele igualarse al diámetro del recipiente. Los resultados del cálculo se presentan en la Tabla 66, donde ha sido incluida la tolerancia por corrosión.

Tabla 66. Espesor de los distintos tipos de cabezal

Espesor cabezales, mm	Valor
Toriesférico	9,77
Elíptico	6,39
Hemisférico	4,20

Finalmente, a pesar de ser el cabezal con mayor espesor, al estar trabajando a una presión cercana a la atmosférica, se decide instalar cabezales toriesféricos para la columna diseñada, pues son los recomendados para presiones bajas.

Los cabezales toriesféricos se pueden dimensionar siguiendo el estándar DIN 28011, en el cual se basan los industriales para su fabricación. La Figura 27 muestra los parámetros que serán calculados, donde KR es el radio del nudillo (la transición entre la zona cilíndrica y la parte superior), estimado como el 10% del radio de la corona y TH_i es la altura total de la parte interna del cabezal, determinada con la expresión mostrada a continuación.

$$TH_i = 3,5 t + 0,1935 R_c - 0,455 t \quad \text{Ecuación 83}$$

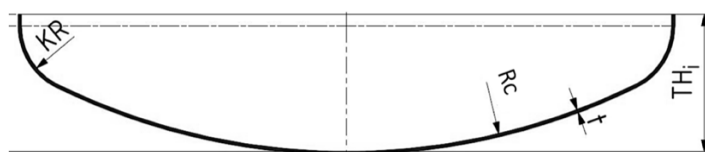


Figura 27. Parámetros de dimensionamiento de cabezales toriesféricos. Fuente: (10)

El resultado de estos cálculos se resume en la Tabla 67.

Tabla 67. Dimensiones del cabezal toriesférico

Parámetro	Valor
KR, mm	480
TH_i, mm	958,55

2.8.6. Altura de la columna

Un factor determinante en el diseño de una columna de destilación es su altura. Para el cálculo se considera el espaciado entre platos, así como el espesor de cada plato, los cabezales y el espacio adicional en los extremos de la columna.

La altura de la totalidad de las etapas se determina multiplicando el espaciado entre platos por el número de etapas menos una y sumándole el espesor de plato por la cantidad total. Esto se ejemplifica en la siguiente expresión:

$$h_{etapas} = 0,6 \cdot (26 - 1) etapas + 3 \times 10^{-3} \cdot 26 etapas = 15,08 m$$

Luego de conocida la altura entre el primer y el último plato, es necesario añadir 4 pies (1,22 m) encima del plato superior para evitar por completo el arrastre de líquido. Asimismo, se han de dejar 10 pies (3,05 m) en el fondo de la columna con el fin de mantener en todo momento un nivel de líquido y para permitir el retorno de vapor de la caldera (11). Finalmente, la altura de la columna se presenta en la Tabla 68.

Tabla 68. Altura de la columna de destilación

Parámetro	Valor
Altura total columna, m	19,35
Altura con cabezales, m	21,28

2.8.7. Aislante

Con el propósito de reducir las pérdidas de calor que se puedan producir hacia el exterior a lo largo de la columna y comprometan la correcta operación, así como por motivos de seguridad de los operadores en caso de contacto con el equipo, se hace necesario instalar un mecanismo de aislamiento alrededor de la torre. Para esto se ha seleccionado un aislante comercializado por la empresa ROCKWOOL, denominado *ProRox® PS 960*, el cual es fabricado a partir de lana de roca y producido con un aglomerante repelente al agua llamado WR-Tech que reduce el riesgo de corrosión debajo del aislamiento. Este aislante es escogido gracias a que es especialmente adecuado para una aplicación industrial, duradero y de sencilla instalación. Sus principales propiedades son presentadas en la Tabla 69.

Tabla 69. Propiedades físicas del aislante *ProRox® PS 960*. Fuente: (12)

Parámetro	Valor
Máxima T de servicio, $^{\circ}C$	650
k_{aisl} , $W/m K$	0,043
C_p , $J/kg K$	1045
ρ , kg/m^3	100

Asumiendo una temperatura ambiente de $20^{\circ}C$, es posible hacer una analogía a un circuito eléctrico con todas las resistencias térmicas presentes en el sistema, siguiendo las indicaciones de la bibliografía (13) para un cuerpo cilíndrico. En la Figura 28 se muestra la nomenclatura designada para los diferentes radios de la columna, siendo r_1 el interno, r_2 el externo, al sumarle el espesor del acero y r_3 el radio de la torre incluyendo el material aislante. El objetivo de este apartado consistirá en determinar este último.

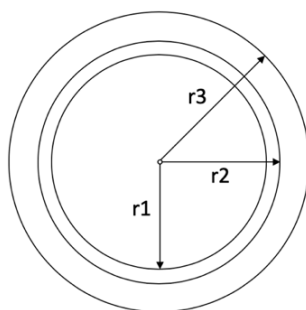


Figura 28. Esquema de la distribución de radios en la columna. Fuente: elaboración propia

Para el cálculo del espesor óptimo del aislante se debe considerar el peor escenario hipotético, en el que la columna se encuentre a la temperatura máxima en toda su longitud. Es posible asumir

que la parte interna de la columna está a esta temperatura, ya que la transmisión de calor cuando se producen cambios de fase es significativa. De este modo, el circuito térmico queda definido según la Figura 29, donde, además, se especifican los valores de las resistencias individuales de cada elemento de transmisión de calor del sistema: la conducción en el acero, la conducción a través del aislante y la convección externa provocada por el viento.

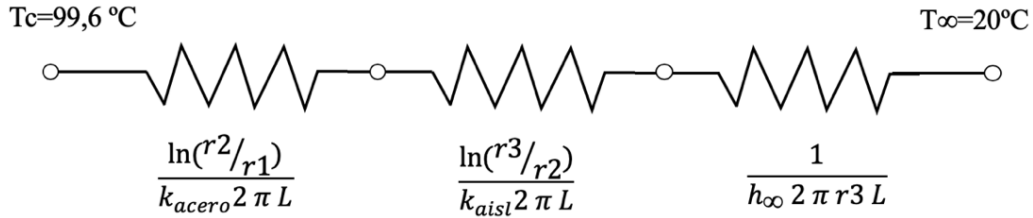


Figura 29. Circuito térmico equivalente. Fuente: elaboración propia a partir de (13)

Así, la expresión del calor Q (W) intercambiado con el exterior queda de la siguiente manera:

$$Q = \frac{T_c - T_\infty}{R_t} \quad \text{Ecuación 84}$$

Donde R_t es la resistencia total del circuito, y se calcula como la suma de todas las resistencias individuales, tal y como se muestra en la Ecuación 85.

$$R_t = \frac{\ln(r_2/r_1)}{k_{acero} 2 \pi L} + \frac{\ln(r_3/r_2)}{k_{aisl} 2 \pi L} + \frac{1}{h_\infty 2 \pi r_3 L} \quad \text{Ecuación 85}$$

Donde k_{acero} es la conductividad térmica del acero inoxidable 304, con un valor bibliográfico de 16 W/m K (2), L es la altura de la columna (m) y h_∞ es el coeficiente de convección del aire fuera de la columna (W/m² K). Este último se estimará asumiendo convección forzada debida al viento que circula alrededor de la torre. Es posible calcularlo a partir de la Ecuación 86.

$$h_\infty = \frac{Nu_D k_{aire}}{D} \quad \text{Ecuación 86}$$

Donde k_{aire} es la conductividad térmica del aire (W/m K), D el diámetro de la columna (m) y Nu_D es el número de Nusselt, un número adimensional que relaciona la convección con la conducción, el cual se puede estimar mediante numerosas correlaciones, dependiendo de diversos factores. Churchill y Bernstein desarrollaron una ecuación para flujo externo en cilindros, siempre y cuando $Re_D Pr > 0,2$, que tiene la siguiente forma:

$$Nu_D = 0,3 + \frac{0,62 Re_D^{1/2} Pr^{1/3}}{\left(1 + \left(\frac{0,4}{Pr}\right)^{2/3}\right)^{1/4}} \left(1 + \left(\frac{Re_D}{282000}\right)^{5/8}\right)^{4/5} \quad \text{Ecuación 87}$$

En esta Re_D hace referencia al número adimensional de Reynolds, y Pr al número de Prandtl. Re_D se determina según la Ecuación 88.

$$Re_D = \frac{\rho v D}{\mu} \quad \text{Ecuación 88}$$

Donde ρ y μ son la densidad y la viscosidad del fluido, respectivamente, y v su velocidad. En la Tabla 70 se presentan las propiedades del aire obtenidas de la literatura (13), así como los resultados del cálculo del coeficiente de convección h_{∞} , asumiendo que la velocidad del viento es de 5 m/s.

Tabla 70. Parámetros del cálculo del coeficiente de convección

Parámetro	Valor
$\rho_{aire}, kg/m^3$	1,1614
$C_{P,aire}, kJ/kg K$	1,007
$\mu_{aire} N s/m^2$	1,85E-05
$k_{aire}, W/m K$	0,0263
Pr	0,707
Re_D	1887432
Nu	1300,96
$Re_D Pr$	1334415 >> 0,2
$h_{\infty}, W/m^2 K$	5,7

De esta forma, se hace posible determinar el espesor óptimo del aislante representando en una gráfica el calor intercambiado con el exterior, determinado con la Ecuación 84, frente al radio r_3 , esto se refleja en la Figura 30. En ella es posible apreciar que, a partir de cierto radio, a pesar de que las pérdidas continúan disminuyendo, los cambios son poco significativos si se comparan con el aumento en el espesor necesario. Así, se requiere encontrar un equilibrio entre las pérdidas de calor admisibles y un espesor de aislante no excesivo. Es por esto por lo que se decide seleccionar un espesor de 586,3 milímetros, el cual se corresponde con un radio r_3 de 3 metros.

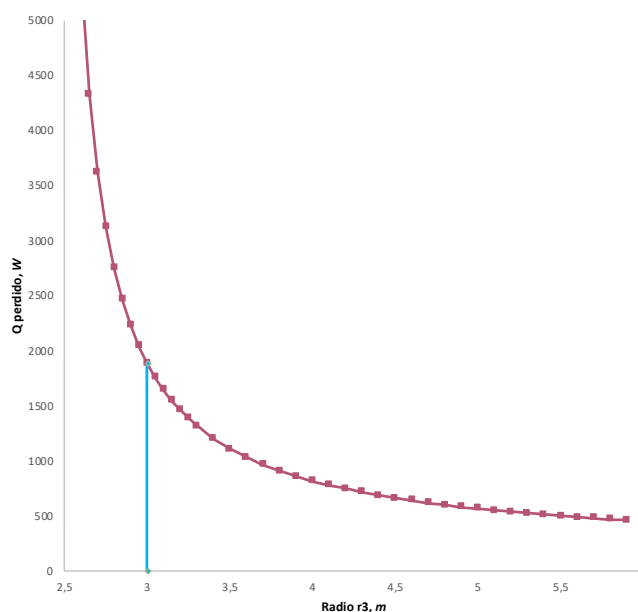


Figura 30. Calor intercambiado con el exterior a diversos espesores de aislante

Una vez escogido el espesor óptimo del aislante, es posible conocer las pérdidas de energía en la columna hacia el exterior y comparar este valor con el calor que se perdería en el caso de no instalar un mecanismo de aislamiento. Estos resultados se presentan en la Tabla 71, y a partir de ellos se determina que se consigue reducir las pérdidas energéticas en la torre casi en su totalidad.

Tabla 71. Reducción de pérdidas energéticas en la columna por acción del aislante

Parámetro	Valor
Q sin aislante, W	164528
Q con aislante, W	1891
Reducción de pérdidas	99%

2.8.8. Análisis de tensiones

Las columnas de destilación están sometidas a diversas cargas, tanto internas como externas, y deben ser diseñadas para soportarlas sin fallar, incluso en el peor de los casos. Las principales fuentes de tensión que han de ser consideradas son la presión, el peso de la columna y de sus accesorios y el viento (2).

Peso muerto de la columna

Las mayores causantes de las cargas por peso muerto son: la carcasa de la columna, los accesorios de la carcasa, tales como las boquillas, los accesorios internos como los platos, y los externos como escaleras, tuberías, y el aislante. Es posible estimar el peso de una columna con cabezales abombados y espesor de pared uniforme a través de la Ecuación 89.

$$W_v = C_v \pi \rho_v D_m g (H_v + 0,8 D_m) t \times 10^{-3} \quad \text{Ecuación 89}$$

Donde W_v hace referencia al peso total de la carcasa, excluyendo los platos (N), C_v es un factor que compensa el peso de boquillas, soportes internos, etc. y cuyo valor para columnas de destilación con numerosos accesorios internos es de 1,15, H_v es la altura del recipiente (m), g es la aceleración de la gravedad, t el espesor de la pared (mm), ρ_v la densidad del material de construcción de la columna (kg/m^3) y D_m el diámetro medio del recipiente (m).

Asimismo, se hace necesario estimar el peso correspondiente a los platos de la columna. A partir de la bibliografía (2) se conoce que, para platos de acero, es posible realizarlo multiplicando el área de cada plato por $1,2 \text{ kN/m}^2$. El resultado de esto incluye la carga típica de líquido por plato.

Por otro lado, el peso del aislante (N) se calcula de acuerdo con la ecuación mostrada a continuación. Este valor deberá ser doblado a modo de compensación por accesorios relacionados con la instalación del mecanismo de aislamiento, sellado y por la posible absorción de humedad.

$$W_{aislante} = \rho_{aisl} H_v \pi g (r_3^2 - r_2^2) \quad \text{Ecuación 90}$$

En la Tabla 72 son presentados los resultados del procedimiento llevado a cabo para determinar el peso muerto de la columna.

Tabla 72. Cálculo del peso muerto de la columna

Parámetro	Valor
$\rho_v, \text{kg/m}^3$	7900
W_v, N	428326
$W_{aislante}, N$	189244,88
W_{platos}, N	564581,90
Peso total, N	1371397,70

Del mismo modo, se requiere la realización de una prueba hidráulica de carga, en la cual la columna estaría llena de agua. El volumen de agua se obtiene a partir del volumen del cilindro, y se considera una densidad de líquido de 1000 kg/m^3 . Al estimar el peso total de la columna en esta prueba, el peso del líquido en los platos es considerado dos veces, sin embargo, se asume correcto, pues el error no es significativo y, además, proporciona un cálculo que conlleva a una mayor seguridad. Los resultados se exponen en la Tabla 73.

Tabla 73. Prueba de carga hidráulica en la columna

Parámetro	Valor
Volumen agua, m^3	350,08
W_{agua}, N	3434255,06
Peso total prueba hidráulica, N	4805652,76

Cargas por viento

Las cargas relacionadas con el viento solo son relevantes cuando se trabaja con columnas altas instaladas al aire libre. Al ser este el caso, se hace necesario determinar sus valores. Debido a que este tipo de equipos esbeltos no suele estar sujetado a estructuras, estos actúan como vigas en voladizo. El momento flector tendrá un comportamiento parabólico desde cero en el punto más alto de la torre hasta el máximo en la base. Este viene dado por la Ecuación 91.

$$M_v = \frac{F_w x^2}{2} \quad \text{Ecuación 91}$$

Donde x es la altura de la columna medida desde el suelo (m) y F_w la carga por unidad de longitud (N/m). Es posible observarlo gráficamente en la Figura 31.

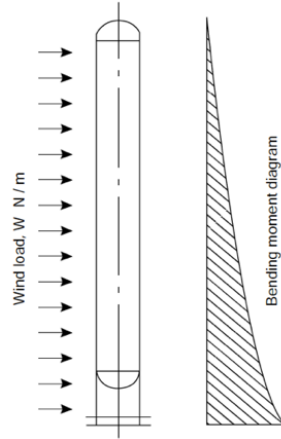


Figura 31. Cargas por viento en una columna alta. Fuente: (2)

Asimismo, la carga impuesta sobre alguna estructura por la acción del viento dependerá de su velocidad y de la forma de la torre. Para una columna de superficie lisa es posible emplear la ecuación semiempírica, Ecuación 92, para estimar la presión del viento, donde P_w hace referencia a este parámetro (N/m^2) y v_w a la velocidad del viento en km/h. Debido a que la columna ha de ser diseñada para soportar la mayor velocidad del viento que pueda producirse, se selecciona un alto valor de 160 km/h para los estudios preliminares.

$$P_w = 0,05 (v_w)^2 \quad \text{Ecuación 92}$$

La carga por unidad de longitud de la columna se puede obtener multiplicando la presión del viento por el diámetro de la columna, incluyendo el aislante, D_{eff} .

$$F_w = P_w D_{eff} \quad \text{Ecuación 93}$$

En la Tabla 74 se recogen los datos conseguidos de las cargas por viento.

Tabla 74. Cálculo de las cargas por viento en la columna

Parámetro	Valor
$P_w, N/m^2$	1280
$F_w, N/m$	7680
$M_v, N.m$	1437188

Esfuerzos primarios

Una vez calculados los parámetros de los anteriores apartados, es posible llevar a cabo la determinación de los principales esfuerzos a los que se encuentra sometida la columna.

El esfuerzo radial y el longitudinal debidos a la presión interna en la columna se definen según las ecuaciones 94 y 95, respectivamente.

$$\sigma_{radial} = \frac{P_i D_i}{2 t} \quad \text{Ecuación 94}$$

$$\sigma_{long} = \frac{P_i D_i}{4 t} \quad \text{Ecuación 95}$$

Por otro lado, la tensión directa generada por el peso de la columna y sus accesorios es calculada a partir de la Ecuación 96, donde W es el peso total soportado por el recipiente (N).

$$\sigma_w = \frac{W}{\pi (D_i + t) t} \quad \text{Ecuación 96}$$

De la misma manera, el pandeo resultante del momento flector al que está sometida la columna será de compresión o de tracción, dependiendo de la ubicación. Este es calculado a partir de la Ecuación 97, en la que I_v es el segundo momento de área del recipiente (m^4) y se obtiene con la Ecuación 98.

$$\sigma_b = \pm \frac{M_v}{I_v} \left(\frac{D_i}{2} + t \right) \quad \text{Ecuación 97}$$

$$I_v = \frac{\pi}{64} (D_0^4 - D_i^4) \quad \text{Ecuación 98}$$

Finalmente, en la Tabla 75 se presentan los valores resultantes de los esfuerzos primarios.

Tabla 75. Esfuerzos primarios en la columna de destilación

Parámetro	Valor
σ_{radial}, MPa	35,39
σ_{long}, MPa	17,70
σ_w, MPa	6,62
I_v, m^4	0,60
σ_b, MPa	$\pm 5,78$

El esfuerzo longitudinal total es obtenido de la siguiente ecuación, considerando que, dependiendo de la dirección del viento, σ_b será positivo o negativo:

$$\sigma_z = \sigma_{long} - \sigma_w \pm \sigma_b \quad \text{Ecuación 99}$$

El espesor de la pared de la columna debe asegurar que la máxima tensión a la que esté sometida sea, en todo punto del recipiente, inferior a la máxima tensión de diseño admisible. En este caso, los esfuerzos principales de la columna serán σ_z y σ_{radial} , siendo la mayor diferencia entre ellos la máxima tensión de la torre. En la Tabla 76 se muestran los valores obtenidos.

Tabla 76. Esfuerzos principales en la columna de destilación

Parámetro	Valor
σ_z (en contra del viento), MPa	16,86
σ_z (a favor del viento), MPa	5,30
$(\sigma_{radial} - \sigma_z)_{m\acute{a}x}, MPa$	30,10

Como es posible apreciar, el esfuerzo máximo real es sumamente inferior al máximo permisible para el acero inoxidable 304, 130 MPa. En consecuencia, se determina que el espesor de pared escogido es apropiado y seguro para la columna de destilación diseñada.

2.8.9. Boquillas

Todo recipiente industrial consta de múltiples boquillas. La columna de destilación T-304 tendrá una para el ingreso de la alimentación, una en cada extremo, para la salida de las corrientes de producto, así como una para el reflujo y otra para el retorno de vapor. Asimismo, deberá tener al menos una boca de hombre que sirva para que operarios sean capaces de ingresar en la torre una vez que esté en funcionamiento para realizar labores de mantenimiento en su interior, estas suelen tener un diámetro de alrededor de 0,6 metros. Además, serán necesarias otras boquillas de menor tamaño para instrumentación, drenajes y venteos.

2.8.10. Soporte de la columna

Para finalizar el diseño, se necesita dimensionar el soporte sobre el que se colocará la columna, y, al tratarse de un recipiente vertical de gran altura, este será de tipo falda, ya que no provocan cargas concentradas en la carcasa de la torre. El soporte deberá ser capaz de resistir el peso de la torre y su contenido, así como las cargas externas, tales como las generadas por el viento.

El soporte tipo falda consiste en una armazón cilíndrica o cónica soldada a la base de la columna. En la Figura 32 se muestran dos diseños típicos de faldas. A estos soportes se les deberán incorporar las aperturas necesarias para el acceso a todas las tuberías correspondientes al correcto funcionamiento de la columna (2).

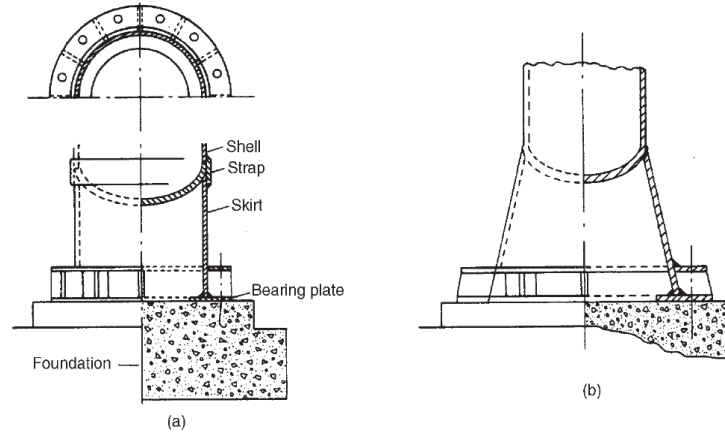


Figura 32. Típicos diseños de soportes de falda. a) falda recta y b) falda cónica. Fuente: (2)

Como ya fue indicado, el espesor de la falda debe ser suficiente para soportar las cargas por el peso muerto del recipiente y el pandeo causado por viento. Los esfuerzos resultantes en el soporte serán, entonces, los representados por la Ecuación 100 y la Ecuación 101.

$$\sigma_s(\text{tracción}) = \sigma_{bs} - \sigma_{ws} \quad \text{Ecuación 100}$$

$$\sigma_s(\text{compresión}) = \sigma_{bs} + \sigma_{ws} \quad \text{Ecuación 101}$$

Donde σ_{bs} representa el esfuerzo por pandeo en la falda (MPa), calculado con la Ecuación 102 y σ_{ws} el esfuerzo por el peso muerto (MPa), obtenido mediante la Ecuación 103.

$$\sigma_{bs} = \frac{4 M_s}{\pi (D_s + t_s) t_s D_s} \quad \text{Ecuación 102}$$

$$\sigma_{ws} = \frac{W}{\pi (D_s + t_s) t_s} \quad \text{Ecuación 103}$$

En estas ecuaciones M_s es el máximo momento flector evaluado en la base de la falda (N.m), el cual se determina con la Ecuación 91, W es el peso total del recipiente (N), D_s el diámetro interno de la falda en la base y t_s el espesor de la falda. este último ha de ser tal que no se excedan bajo ninguna circunstancia los siguientes criterios de diseño:

$$\sigma_s(\text{tracción}) \nless f_s E \text{ seno}(\theta_s) \quad \text{Ecuación 104}$$

$$\sigma_s(\text{compresión}) \nless 0,125 E_y \frac{t_s}{D_s} \text{ seno}(\theta_s) \quad \text{Ecuación 105}$$

Donde f_s es el máximo esfuerzo permisible para el material de construcción de la falda, usualmente considerado a temperatura ambiente (20 °C), E es el factor eficacia de las juntas, E_y es el módulo de Young (MPa) y θ_s es el ángulo de la base de la falda, al cual se le asigna normalmente un valor entre 80° y 90°.

En esta ocasión, la falda será recta, construida con acero al carbono. Para una primera estimación, se considerará un espesor de falda igual al de la columna, sin considerar la corrosión (11,7 mm) y una altura de 3 metros. El mayor peso muerto en la falda se producirá en la prueba hidráulica con agua. En la Tabla 77 son presentadas las propiedades del acero, los parámetros calculados y los resultados obtenidos de los esfuerzos en el soporte.

Tabla 77. Cálculo de los esfuerzos resultantes en el soporte tipo falda

Parámetro	Valor
θ_s	90°
Tensión de diseño: Acero al Carbono (20 °C), MPa	135
E_y , MPa	200000
E	0,85
D_s , m	4,83
t_s , m	0,0117
Altura falda, m	3
$H_{v,total}$, m	22,35
M_s , N.m	1917480
σ_{bs} , MPa	8,93
σ_{ws} (prueba hidráulica), MPa	27,02
σ_{ws} (operación), MPa	7,71
$\sigma_{s,máx}$ (compresión), MPa	35,95
$\sigma_{s,máx}$ (tracción), MPa	1,22
CRITERIO σ_s (compresión), MPa	60,59
CRITERIO σ_s (tracción), MPa	114,75

Es posible apreciar que ambos criterios de diseño son satisfechos, por lo que se considera que el espesor de la falda es correcto, y, finalmente, se le añaden 2 milímetros adicionales debido a la corrosión que pueda sufrir el metal, resultando en un espesor de 13,7 mm.

3. DISEÑO DE LA VÁLVULA DE ALIVIO

Con el fin de garantizar la seguridad del equipo y, en consecuencia, de la planta, en caso de un fallo en la operación que genere sobrepresión en la columna, será necesario instalar una válvula de alivio de presión (PSV-329) en la parte superior de esta. Para ello, se dimensionará y seleccionará una válvula de acuerdo con lo establecido en el Código ASME, Sección VIII y siguiendo las indicaciones del estándar API 520, el cual proporciona una guía para llevar a cabo esta labor en equipos de refinerías o establecimientos similares.

De esta forma, al tratarse de una columna de destilación, la corriente de cabezas estará en fase vapor, por lo que se aplicará el procedimiento de diseño de una válvula de alivio de vapor. Para ello, el primer requerimiento es determinar si se opera en condiciones de flujo crítico o no mediante la relación de gases ideales representada por la Ecuación 106. Con esta se estimará la presión crítica de flujo a través de la boquilla, P_{cf} , que, si resulta ser mayor o igual que la presión aguas abajo del equipo, se dice que ocurre flujo crítico.

$$\frac{P_{cf}}{P_1} = \left[\frac{2}{k+1} \right]^{\frac{k}{k-1}} \quad \text{Ecuación 106}$$

En esta ecuación k representa el cociente entre las capacidades caloríficas para el gas ideal, (C_p/C_v) , obtenido a través del simulador *Aspen HYSYS*. A su vez, la presión aguas arriba (P_1) es la presión de entrada al dispositivo de alivio. Esta es calculada como el producto de la presión de diseño en el equipo y un factor de sobrepresión del 10%, adicionándole la presión atmosférica, tal y como se muestra en la Ecuación 107.

$$P_1 = P_{diseño} \cdot 1,1 + P_{atm} \quad \text{Ecuación 107}$$

Así, se obtienen los resultados presentados en la Tabla 78, con los que se concluye que se deberá diseñar la válvula siguiendo el procedimiento indicado para flujo crítico, pues la presión de salida del equipo (atmosférica) es inferior a la presión de flujo crítico en la boquilla, P_{cf} .

Tabla 78. Determinación del tipo de flujo en la válvula

Parámetro	Valor
P_1, kPa	323,57
k_{ideal}	1,21
P_{cf}, kPa	181,77

El área efectiva de descarga de la válvula de alivio (A, mm^2) para flujo crítico es determinada a partir de la Ecuación 109, donde W hace referencia al caudal de vapor requerido a través del dispositivo (kg/h), C es un coeficiente que se calcula en función de k empleando la relación mostrada en la Ecuación 108, K_d es el coeficiente efectivo de descarga, que toma un valor de 0,975 cuando el dispositivo a instalar es una válvula de alivio. Además, K_b es un factor de corrección de capacidad debido a la contrapresión, mas este no se aplica en válvulas convencionales, por lo que se le otorga un valor de 1. Igualmente, K_c es el factor de corrección para instalaciones con un disco de ruptura anterior a la PSV, cuando este no está implementado el parámetro es 1. T es la temperatura de alivio del vapor en Kelvin, Z el factor de compresibilidad del vapor que representa la desviación de la idealidad y M la masa molecular de la corriente (kg/kmol).

$$C = 0,03948 \sqrt{k \left[\frac{2}{k+1} \right]^{\frac{k+1}{k-1}}} \quad \text{Ecuación 108}$$

$$A = \frac{W}{C \cdot K_d \cdot P_1 \cdot K_b \cdot K_c} \sqrt{\frac{T \cdot Z}{M}} \quad \text{Ecuación 109}$$

Los datos empleados para determinar el área de la válvula y los resultados de este cálculo se pueden apreciar en la Tabla 79.

Tabla 79. Determinación del área efectiva de descarga necesaria para la válvula de alivio de presión

Parámetro	Valor
$W, kg/h$	157340,54
C	0,026
K_d	0,975
K_b	1
K_c	1
T, K	338
Z	1
$M, kg/kmol$	31,9
A, mm^2	63141

Finalmente, se ha de seleccionar un dispositivo de alivio de presión con un área de descarga igual o mayor a la calculada para su instalación en la columna de destilación. Es necesario escoger una válvula que esté disponible a nivel comercial, y, para esto, se hace uso de un catálogo de válvulas Crosby (14), en el cual se comprueba que la apropiada para esta aplicación es una válvula Z_2 de estilo JO/JB, con un área efectiva total de 70232 mm².

4. BIBLIOGRAFÍA

1. **STICHLMAIR, J. G. y J. R. FAIR.** *Distillation: Principles and Practices*. Nueva York: Wiley-VCH, 1998. ISBN: 0-471-25241-7.
2. **SINNOTT, R. K.** *Chemical Engineering Design*. 4ª edición. Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. Vol. 6. ISBN: 0-7506-6538-6.
3. **WANKAT, P. C.** *Separation Process Engineering: Includes Mass Transfer Analysis*. Nueva Jersey : Prentice Hall, 2017. ISBN: 978-0-13-344365-3.
4. **SMITH, J.M., H. C. VAN NESS y M. M. ABBOTT.** *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. México, D.F.: McGraw-Hill, Inc., 1996. ISBN: 970-10-1333-6.
5. **REID, R. C., J.M PRAUSNITZ y B. E. POLING.** *The Properties of Gases and Liquids*. 4ª edición. Nueva York: McGraw-Hill, Inc., 1987. ISBN: 0-07-051799-1.
6. **PERRY, R. H. y D. W. GREEN.** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 7ª edición. Nueva York: McGraw-Hill, 1999. ISBN: 0-07-049841-5.
7. **ASHBY, M. F.** *Materials Selection in Mechanical Design*. 3ª edición. Oxford: Elsevier, 2005. ISBN: 0-7506-6168-2.
8. **GRACO.** *Chemical Compatibility*. [En línea] 2013. [Citado el: 20 de abril de 2020.] Disponible en: https://www.graco.com/content/dam/graco/ipd/literature/misc/chemical-compatibility-guide/Graco_ChemCompGuideEN-B.pdf.
9. **TURTON, R. et al.** *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 3ª edición. Nueva Jersey: Prentice Hall, 2009. ISBN 0-13-512966-4.
10. **SLAWINSKI.** *Torispherical Head according to DIN 28011*. [En línea] [Citado el: 28 de abril de 2020.] Disponible en: <https://www.slawinski.co.uk/products/torispherical-heads/>.
11. **SEADER, J. D., E. J. HENLEY y D. K. ROPER.** *Separation Process Principles: Chemical and Biochemical Operations*. 3ª edición. Nueva Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2011. ISBN: 978-0-470-48183-7.
12. **ROCKWOOL.** *ProRox PS 960 with WR-Tech*. [En línea] 30 de noviembre de 2018. [Citado el: 20 de abril de 2020.] Disponible en: https://cdn01-rti.rockwool.com/siteassets/tools--documentation/documentation/countries/industrial---uk/datasheets/rti-prorox-ps-960_wr-tech_en_uk.pdf?f=20190415033350.
13. **INCROPERA, F. P. et al.** *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 6ª edición. Danvers : John Wiley & Sons, Inc., 2007. ISBN-13: 978-0-471-45728-2.
14. **CROSBY VALVE INC.** *Crosby Pressure Relief Valve Engineering Handbook*. Massachusetts: Crosby Valve Inc., 1997.
15. **HOLLAND, C. D.** *Fundamentals of Multicomponent Distillation*. Nueva York: McGraw-Hill Book Company, 1981. ISBN: 0-07-029567-0.

ANEXO III

Análisis de viabilidad económica

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	2
2. INVERSIÓN INICIAL	2
3. FINANCIACIÓN	2
4. COSTES DE PRODUCCIÓN.....	3
4.1.1. Costes de manufactura	4
4.1.2. Gastos generales	6
4.1.3. Amortización	7
5. INGRESOS	8
6. FLUJOS DE CAJA	8
7. EVALUACIÓN DE RENTABILIDAD.....	10
7.1. Periodo de retorno o <i>Payback</i>	10
7.2. Valor Actual Neto (VAN).....	10
7.3. Tasa Interna de Retorno (TIR).....	11
8. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD	11
9. BIBLIOGRAFÍA.....	14

1. INTRODUCCIÓN

En todo proyecto es necesario efectuar una evaluación económica, pues un proceso industrial solamente posee estabilidad en el mercado si su aspecto económico es favorable. Para dicha evaluación se emplearán dos indicadores para determinar la rentabilidad del proyecto: el VAN (Valor Actual Neto) y la TIR (Tasa Interna de Retorno). Del mismo modo, se medirán los ingresos y gastos a través de los flujos de caja y se determinará el año en que se espera recuperar la inversión inicial (también conocido como *payback*).

Con el fin de determinar los parámetros anteriores, resulta necesario conocer previamente la inversión inicial (formado por el capital fijo y el circulante), los ingresos procedentes de la venta del producto (óxido de propileno), así como los costes asociados a la producción de este. Finalmente, los principales parámetros que condicionan la inversión: el coste de las materias primas, el coste del óxido de propileno y la inversión inicial, serán sometidos a un análisis de sensibilidad.

2. INVERSIÓN INICIAL

La inversión inicial del proyecto consiste en el desembolso que ha de ser realizado una vez tomada la decisión de construir la planta industrial. Esta cubrirá, los costes de capital fijo, donde destacan la maquinaria y demás activos necesarios para la operación, así como los de capital circulante, el cual representa el dinero en efectivo del que dispone la empresa para gastos inmediatos. El monto fue determinado en el *Documento V. Presupuesto*, siendo de un total de 29.176.633,93 €.

3. FINANCIACIÓN

Con el objetivo de disponer de la cuantía de dinero correspondiente a la inversión inicial requerida para el proyecto, se hace necesario acudir a una entidad bancaria capaz de proveer un préstamo por esta cantidad, el cual deberá ser devuelto en cuotas periódicas junto con los intereses correspondientes. De esta manera, se llevará a cabo una estimación del valor de estas cuotas mediante la aplicación del sistema de amortización francés, comúnmente utilizado en el territorio español. Este método consiste en el pago de cuotas anuales con un valor constante a lo largo de un cierto periodo. Por otro lado, las proporciones de devolución del préstamo variarán de un año a otro, pues los intereses calculados serán aplicados solo al capital vivo restante, así, los intereses serán mayores en los primeros años, y, a medida que va disminuyendo la deuda, la amortización del préstamo tendrá mayor participación en el total de la cuota (1).

Para la determinación de la anualidad se emplea la Ecuación 1, donde C_0 hace referencia al monto total del préstamo, i al tipo de interés anual del préstamo y n al número de cuotas en que se dividirán los pagos, coincidiendo en este caso con la vida útil estimada de la planta, 20 años (2).

$$a = C_0 \left(\frac{i}{1 - (1 + i)^{-n}} \right) \quad \text{Ecuación 1}$$

Respecto a la tasa de interés anual, se tomará un valor estimado del 6%, y, como fue mencionado anteriormente, este porcentaje es aplicado sobre el capital pendiente de amortizar, por lo que su valor varía cada año, mientras que la amortización de la deuda se corresponde con la cantidad restante de la anualidad. En la Tabla 1 se recogen los resultados conseguidos al aplicar el método de amortización francés para la previsión del préstamo bancario necesario en la planta en cuestión para cubrir los gastos iniciales.

Tabla 1. Financiación de la inversión inicial

Año	Cuota	Interés	Amortización	Capital vivo
0				29.176.633,93 €
1	2.543.751,90 €	1.750.598,04 €	793.153,87 €	28.383.480,06 €
2	2.543.751,90 €	1.703.008,80 €	840.743,10 €	27.542.736,96 €
3	2.543.751,90 €	1.652.564,22 €	891.187,69 €	26.651.549,28 €
4	2.543.751,90 €	1.599.092,96 €	944.658,95 €	25.706.890,33 €
5	2.543.751,90 €	1.542.413,42 €	1.001.338,48 €	24.705.551,85 €
6	2.543.751,90 €	1.482.333,11 €	1.061.418,79 €	23.644.133,05 €
7	2.543.751,90 €	1.418.647,98 €	1.125.103,92 €	22.519.029,13 €
8	2.543.751,90 €	1.351.141,75 €	1.192.610,16 €	21.326.418,98 €
9	2.543.751,90 €	1.279.585,14 €	1.264.166,76 €	20.062.252,21 €
10	2.543.751,90 €	1.203.735,13 €	1.340.016,77 €	18.722.235,44 €
11	2.543.751,90 €	1.123.334,13 €	1.420.417,78 €	17.301.817,67 €
12	2.543.751,90 €	1.038.109,06 €	1.505.642,84 €	15.796.174,82 €
13	2.543.751,90 €	947.770,49 €	1.595.981,41 €	14.200.193,41 €
14	2.543.751,90 €	852.011,60 €	1.691.740,30 €	12.508.453,11 €
15	2.543.751,90 €	750.507,19 €	1.793.244,72 €	10.715.208,40 €
16	2.543.751,90 €	642.912,50 €	1.900.839,40 €	8.814.369,00 €
17	2.543.751,90 €	528.862,14 €	2.014.889,76 €	6.799.479,23 €
18	2.543.751,90 €	407.968,75 €	2.135.783,15 €	4.663.696,08 €
19	2.543.751,90 €	279.821,77 €	2.263.930,14 €	2.399.765,95 €
20	2.543.751,90 €	143.985,96 €	2.399.765,95 €	0,00 €

4. COSTES DE PRODUCCIÓN

A la hora de realizar el análisis económico es imprescindible conocer el coste asociado a la operación de la planta en el día a día. Existen múltiples elementos que afectan al coste de elaboración de los productos químicos y que pueden subdividirse en tres categorías: costes directos de manufactura, gastos generales y amortización del capital fijo. Finalmente, los costes totales de producción se calculan como la suma de la cuantía total de cada una de las categorías mencionadas.

4.1.1. Costes de manufactura

Estos costes representan los gastos relacionados con la operación de la planta y que varían en función de la tasa de producción. Cuando la demanda del producto cae, la velocidad de producción se ve reducida por debajo de la capacidad de diseño. Como consecuencia, cabe esperar una reducción en los factores a partir de los que se obtienen los costes de manufactura.

Estos costes se encuentran constituidos por los costes de los reactivos, el disolvente, el catalizador, los servicios auxiliares, la mano de obra directa e indirecta, el mantenimiento y las reparaciones, los costes de distribución, gastos de laboratorio y los asociados a patentes y regalías. La obtención del valor de cada uno de estos será descrita en las próximas líneas.

En primer lugar, se procede a estimar los gastos asociados a los materiales de partida empleados y el disolvente necesario (metanol) en un año de operación de la planta, considerando que esta opera de manera continua durante 330 días al año. Los precios de los compuestos químicos, así como las cantidades empleadas y el coste obtenido se recogen en la Tabla 2.

Tabla 2. Coste de las materias primas y el disolvente

Compuesto	Requerimiento anual (ton)	Precio (€/ton)	Coste (€)
Propileno	156216,22	850	132.783.785,64
Peróxido de hidrógeno	150031,41	426	63.913.381,17
Metanol	774,42	200	154.883,52

Asimismo, se procede al cálculo del coste asociado al catalizador empleado. Puesto que se emplea un catalizador especial de TS-1 este presenta un elevado coste: 572 €/kg. Conocida la masa de catalizador empleada en el reactor (6015 kg), y asumiendo que, con la finalidad de compensar la pérdida de eficiencia progresiva debida a la desactivación de este, se efectuará el reemplazo del catalizador durante la parada anual programada para el mantenimiento de la planta, es posible determinar que su coste en un año asciende a 3.440.580,00 €.

Por otro lado, las utilidades de la planta juegan un papel importante en los costes de manufactura. Estas se encuentran directamente influenciadas por el coste del combustible, lo cual dificulta realizar una estimación del precio de servicios como la electricidad y el vapor (3). Es por esto por lo que su coste será considerado como un 10% del coste total de los reactivos.

Del mismo modo, la mano de obra resulta imprescindible en toda planta química, por consiguiente, es necesario estimar los costes asociados al personal. Para determinar la obra de mano directa requerida, se emplea la Ecuación 2 proporcionada en la bibliografía (3).

$$N_{OL} = (6,29 + 31,7P^2 + 0,23N_{np})^{0,5} \quad \text{Ecuación 2}$$

Siendo N_{OL} el número de operadores por turno, P el número de etapas del proceso que involucran el trabajo con partículas sólidas y N_{np} la cantidad de etapas del proceso donde no se emplean

sólidos y que incluyen: compresión, calentamiento y enfriamiento, mezclado y reacciones. Para el proceso en cuestión el valor de P resulta cero y N_{np} se calcula según la Ecuación 3.

$$N_{np} = \sum_{\substack{\text{compresores} \\ \text{torres} \\ \text{reactores} \\ \text{intercambiadores}}} \text{Equipos} \quad \text{Ecuación 3}$$

A partir de los datos recogidos en la Tabla 3 se obtiene el número de etapas del proceso donde no son utilizados sólidos.

Tabla 3. Cálculo de N_{np}

Equipo	Número de unidades
Compresores	2
Intercambiadores	12
Reactores	1
Torres	4
N_{np}	19

Finalmente, se procede al cálculo del valor de N_{OL} , el cual se corresponde con el número de operadores requeridos para la ejecución del proceso en cada turno. Un único operador trabaja una media de 48 semanas al año, dejando cuatro semanas libres para vacaciones y posibles ausencias por enfermedad, y realiza cinco turnos de ocho horas por semana. De esta forma se puede estimar que cada trabajador al año realiza 240 turnos (48 semanas/año x 5 turnos/semana). Puesto que se considera que la planta química opera 24 horas/día, esto requiere 1095 turnos anuales (365 días/año x 3 turnos/día). Por último, a partir de los datos anteriores se estipula el número de operadores necesarios para cubrir todos los turnos [(1095 turnos/año)/(240 turnos/operador/año)], resultando en aproximadamente 4,5 operadores. Así, es asumido que deben ser contratados cuatro operadores y medio por cada operador necesario en la planta en cualquier momento ($4,5 \times N_{OL}$), es decir, la planta de HPPO deberá contar con un total de 15 operadores.

Cabe mencionar que este número no incluye al personal encargado de dar soporte o supervisión, pues estos se engloban dentro de la mano de obra indirecta. Finalmente, para calcular el coste asociado a la contratación de los quince operadores, se tiene en cuenta que el salario medio en España el año 2019 fue de 27.537 € (4). Considerando que los sueldos de los operadores de plantas químicas son relativamente altos, se asume un salario bruto de 35.000 € al año, que serán repartidos en catorce pagas (una por cada mes, y dos extras por navidad y verano) de 2500 €.

Por otro lado, es posible estimar el coste de la mano de obra indirecta como un 15% de los de mano de obra directa. Esta cubrirá los gastos relacionados con el personal que contribuye para el correcto funcionamiento de la planta, mas no está involucrado en el proceso de manufactura de manera directa. Entre estos se encuentran los encargados de la supervisión, los trabajadores administrativos... (5).

Igualmente, el mantenimiento y las reparaciones de los equipos y demás instalaciones de la planta, incluyendo el coste de la mano de obra y los materiales, tienen un impacto en los costes totales de la empresa. Su monto se estima como un 3% de los costes fijos de capital, determinados en el *Documento V. Presupuesto*.

De igual forma, se hace necesario realizar una estimación de los suministros para la operación, los cuales consisten en los costes de diversas provisiones que hacen posible la operación diaria sin ser consideradas materiales de partida. Algunos ejemplos de esto son los lubricantes, filtros, equipos de protección personal de los operarios y productos químicos varios. Este ítem es calculado como un 0,9% de los costes fijos de capital totales.

Los cargos derivados de los laboratorios han de ser tomados en cuenta también, pues implican los costes de pruebas de laboratorio rutinarias y extraordinarias requeridas para garantizar la calidad del producto y la corrección de complicaciones en la operación. Será, de esta manera, estimado como un 15% del gasto por la mano de obra directa.

Por último, un 0,5% de los costes de manufactura son asignados al pago de patentes y regalías (*royalties*) relacionadas con el uso de licencias de tecnologías. Así los costes totales de manufactura se pueden resumir de acuerdo con lo mostrado en la Tabla 4.

Tabla 4. Resultados del cálculo de los costes de manufactura

Costes de manufactura	
1. Materias primas	196.697.166,81 €
2. Disolvente	154.883,52 €
3. Catalizador	3.440.580,00 €
4. Servicios generales/Utilidades	19.669.716,68 €
5. Mano de obra directa	525.000,00 €
6. Mano de obra indirecta	78.750,00 €
7. Mantenimiento y reparaciones	798.579,73 €
8. Costes de distribución/ Suministros de explotación	239.573,92 €
9. Gastos de laboratorio	78.750,00 €
10. Patentes y regalías (derechos de patentes)	1.142.695,88 €
TOTAL	228.539.175,93 €

4.1.2. Gastos generales

Representan los costes asociados con la dirección y administración de la planta, siendo de esta forma independientes del proceso de manufactura. Entre ellos se encuentran los costes administrativos, los de distribución y ventas, así como los de investigación y desarrollo (3).

En primer lugar, deben ser estimados los costes referentes a la administración, incluyendo salarios del personal, edificios, materiales y otras actividades relacionadas. Estos se asumen, según la

bibliografía empleada para estos cálculos aproximados (3), como la suma del 17,7% del coste de mano de obra de operación y del 0,9% de los costes fijos de capital.

Del mismo modo, los gastos comerciales, relativos a las ventas y el mercadeo necesario para vender productos químicos, incluyen los salarios correspondientes y otros costes misceláneos. Estos representan un 3% de los costes de manufactura.

Finalmente, los costes de investigación y desarrollo se estiman como un 1% de los costes totales de manufactura, y pretenden cubrir los gastos de las actividades de investigación relacionada con el proceso y el producto. Esto comprende salarios y financiación para equipos y suministros relativos al trabajo de investigación. En la Tabla 5 mostrada a continuación es posible apreciar el desglose de los costes generales de la planta en cuestión.

Tabla 5. Resultados del cálculo de los gastos generales

Gastos generales	
1. Gastos administrativos	332.498,92 €
2. Gastos comerciales	6.856.175,28 €
3. Investigación	2.285.391,76 €
TOTAL	9.474.065,96 €

4.1.3. Amortización

El capital inmovilizado pierde progresivamente su valor a lo largo de los años, bien por poseer un tiempo limitado de uso, por el desgaste físico o químico, por el envejecimiento y obsolescencia de equipos o por accidentes. Amortizar reduce la cantidad de impuestos que deben ser pagados, pues se considera que el coste total de la planta está repartido de manera equitativa entre todos los periodos de la vida útil de la planta. Se trata de una partida de coste compensatoria y que es obligatoria a efectos contables. Para el cálculo de dicha cuota se emplea la Ecuación 4.

$$\text{Cuota de amortización} = \frac{\text{Costes fijos} - \text{Coste parcela}}{\text{Vida útil}} \quad \text{Ecuación 4}$$

Se asume una amortización lineal a lo largo de los 20 años útiles de la planta. Cabe destacar que el terreno no es amortizable, pues no pierde valor conforme pasan los años, por este motivo, se descuenta su valor sobre los costes fijos. En la Tabla 6 se recogen los valores empleados para el cálculo.

Tabla 6. Cálculo de la amortización

Amortización	
Costes fijos	26.619.324,19 €
Coste parcela	2.751.100,00 €
Vida útil	20 años
Cuota anual amortizada	1.193.411,21 €

A modo de resumen, se pueden conocer los datos de los costes totales de producción para el primer año de operación de la planta en cuestión. Estos se reflejan en la Tabla 7.

Tabla 7. Resultados de costes totales de producción

Costes totales de producción	
1. Costes de manufactura	228.539.175,93 €
2. Gastos generales	9.474.065,96 €
3. Amortización	1.193.411,21 €
TOTAL	239.206.653,10 €

5. INGRESOS

Se asume que la totalidad de los ingresos que proporcionará la planta HPPO procederán de la venta del óxido de propileno. En el *Documento I. Memoria* fue presentado el precio en el mercado de dicho compuesto químico: 1640 €/ton. Puesto que se estipuló una capacidad de producción de la planta de 150 kilotoneladas por año, los ingresos anuales ascienden a 245.999.948,83 €.

6. FLUJOS DE CAJA

Tras determinar los costes totales de producción, la financiación requerida, así como los ingresos por ventas, es importante recordar que los resultados se corresponden con los datos del primer año operativo de la planta. Así, a medida que avanza el tiempo será necesario aplicar un aumento a estos valores basados en un porcentaje de inflación. Esta se puede estimar mediante el IPC, cuyo valor suele fluctuar a lo largo de los años (6), por lo que se especifica un valor medio del 2%.

Con el propósito de determinar la rentabilidad del proyecto y por ende la viabilidad económica de la planta diseñada, serán calculados los flujos de caja correspondientes al periodo de vida útil previsto para la empresa. Para ello, se tomarán en consideración los ingresos por ventas, a los que se les restarán los costes totales de producción, así como los intereses de la deuda contraída y la amortización del inmovilizado. El valor resultante de este cálculo representará el beneficio antes de impuestos, al que será necesario aplicarle los impuestos correspondientes. Estos impuestos para explotaciones industriales se suelen estimar en un 30%. Por último, es posible determinar el beneficio neto, al cual se le ha de adicionar el monto de la amortización, pues este no supone una salida de caja, dando lugar al flujo neto de caja de dicho año.

Asimismo, se calcularán los flujos de caja acumulados, en los que se sumará el nuevo flujo de caja al total acumulado hasta el momento. En el caso del año cero, cuando aún no se encuentra operativa la planta, solo se tomará en el flujo de caja el total del desembolso correspondiente a la inversión inicial. De esta manera, los flujos de caja de los 20 años de vida útil pronosticados se muestran en las Tablas 8-10.

Tabla 8. Flujos de caja del año 0 al 7

Año	0	1	2	3	4	5	6	7
Ingresos por ventas (+)		245.999.948,83 €	252.149.947,55 €	258.453.696,24 €	264.915.038,65 €	271.537.914,61 €	278.326.362,48 €	285.284.521,54 €
Costes de producción (-)		239.206.653,10 €	245.186.819,43 €	251.316.489,91 €	257.599.402,16 €	264.039.387,21 €	270.640.371,89 €	277.406.381,19 €
Intereses (-)		1.750.598,04 €	1.703.008,80 €	1.652.564,22 €	1.599.092,96 €	1.542.413,42 €	1.482.333,11 €	1.418.647,98 €
Amortización (-)		1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €
Beneficio antes de impuesto		3.849.286,49 €	4.066.708,11 €	4.291.230,90 €	4.523.132,32 €	4.762.702,77 €	5.010.246,27 €	5.266.081,16 €
Impuestos (-)		1.154.785,95 €	1.220.012,43 €	1.287.369,27 €	1.356.939,70 €	1.428.810,83 €	1.503.073,88 €	1.579.824,35 €
Beneficio neto		2.694.500,54 €	2.846.695,68 €	3.003.861,63 €	3.166.192,63 €	3.333.891,94 €	3.507.172,39 €	3.686.256,81 €
Amortización (+)		1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €
FLUJO NETO DE CAJA	-29.176.633,93 €	3.887.911,75 €	4.040.106,89 €	4.197.272,84 €	4.359.603,84 €	4.527.303,15 €	4.700.583,60 €	4.879.668,02 €
Flujo de caja acumulado	-29.176.633,93 €	-25.288.722,18 €	-21.248.615,29 €	-17.051.342,45 €	-12.691.738,61 €	-8.164.435,46 €	-3.463.851,87 €	1.415.816,15 €

Tabla 9. Flujos de caja del año 8 al 15

Año	8	9	10	11	12	13	14	15
Ingresos por ventas (+)	292.416.634,58 €	299.727.050,44 €	307.220.226,71 €	314.900.732,37 €	322.773.250,68 €	330.842.581,95 €	339.113.646,50 €	347.591.487,66 €
Costes de producción (-)	284.341.540,72 €	291.450.079,24 €	298.736.331,22 €	306.204.739,50 €	313.859.857,99 €	321.706.354,44 €	329.749.013,30 €	337.992.738,63 €
Intereses (-)	1.351.141,75 €	1.279.585,14 €	1.203.735,13 €	1.123.334,13 €	1.038.109,06 €	947.770,49 €	852.011,60 €	750.507,19 €
Amortización (-)	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €
Beneficio antes de impuesto	5.530.540,90 €	5.803.974,86 €	6.086.749,14 €	6.379.247,54 €	6.681.872,42 €	6.995.045,81 €	7.319.210,39 €	7.654.830,63 €
Impuestos (-)	1.659.162,27 €	1.741.192,46 €	1.826.024,74 €	1.913.774,26 €	2.004.561,73 €	2.098.513,74 €	2.195.763,12 €	2.296.449,19 €
Beneficio neto	3.871.378,63 €	4.062.782,40 €	4.260.724,40 €	4.465.473,28 €	4.677.310,70 €	4.896.532,07 €	5.123.447,27 €	5.358.381,44 €
Amortización (+)	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €
FLUJO NETO DE CAJA	5.064.789,84 €	5.256.193,61 €	5.454.135,61 €	5.658.884,49 €	5.870.721,91 €	6.089.943,28 €	6.316.858,48 €	6.551.792,65 €
Flujo de caja acumulado	6.480.605,99 €	11.736.799,60 €	17.190.935,21 €	22.849.819,70 €	28.720.541,61 €	34.810.484,88 €	41.127.343,36 €	47.679.136,02 €

Tabla 10. Flujos de caja del año 16 al 20

Año	16	17	18	19	20
Ingresos por ventas (+)	356.281.274,85 €	365.188.306,72 €	374.318.014,39 €	383.675.964,75 €	393.267.863,87 €
Costes de producción (-)	346.442.557,10 €	355.103.621,02 €	363.981.211,55 €	373.080.741,84 €	382.407.760,38 €
Intereses (-)	642.912,50 €	528.862,14 €	407.968,75 €	279.821,77 €	143.985,96 €
Amortización (-)	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €
Beneficio antes de impuesto	8.002.394,04 €	8.362.412,35 €	8.735.422,88 €	9.121.989,94 €	9.522.706,32 €
Impuestos (-)	2.400.718,21 €	2.508.723,70 €	2.620.626,86 €	2.736.596,98 €	2.856.811,90 €
Beneficio neto	5.601.675,83 €	5.853.688,64 €	6.114.796,01 €	6.385.392,96 €	6.665.894,42 €
Amortización (+)	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €	1.193.411,21 €
FLUJO NETO DE CAJA	6.795.087,04 €	7.047.099,85 €	7.308.207,22 €	7.578.804,17 €	7.859.305,63 €
Flujo de caja acumulado	54.474.223,05 €	61.521.322,91 €	68.829.530,13 €	76.408.334,30 €	84.267.639,93 €

7. EVALUACIÓN DE RENTABILIDAD

7.1. Periodo de retorno o *Payback*

Se trata de un indicador que aporta información sobre el tiempo que se requiere para recobrar la inversión inicial realizada. Este es calculado sumando de manera acumulativa los flujos de caja determinados anteriormente siendo el período de retorno el año donde el flujo de caja acumulado cambie su valor de negativo a positivo. La representación gráfica empleada para la determinación del *payback* se ilustra en la Figura 1. Sin embargo, como principal desventaja de este indicador cabe mencionar que ignora el valor del dinero a través del tiempo (7).

Atendiendo a la regla del periodo de recuperación, una inversión será etiquetada como aceptable siempre y cuando su periodo de retorno sea menor al tiempo de vida útil del proyecto. Para la inversión en la planta HPPO, se obtiene un *payback* de **siete años** y, por tanto, es aceptable: antes de llegar al ecuador de la vida útil de la planta se habrá recuperado el desembolso inicial realizado.

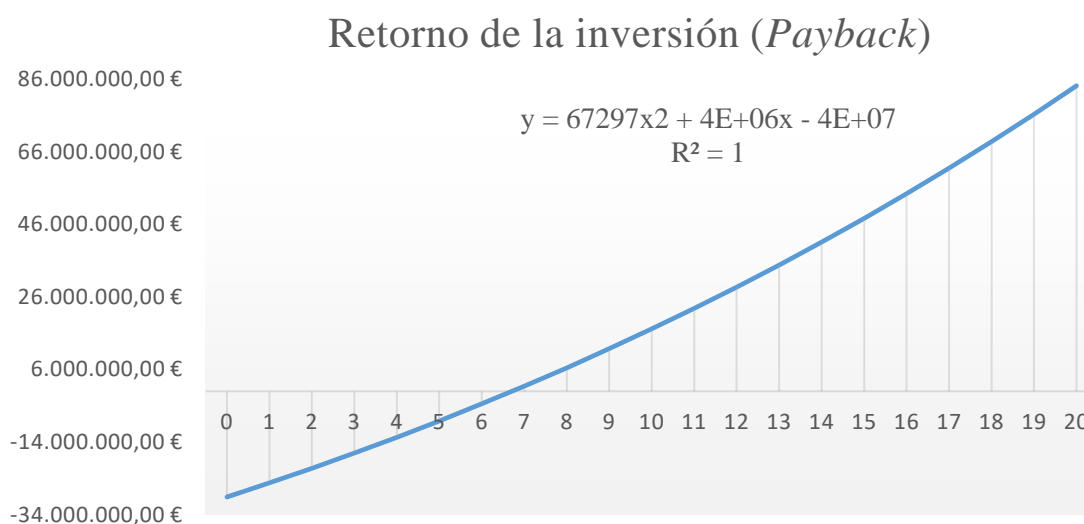


Figura 1. *Payback* de la planta de HPPO

La relación existente entre los flujos de caja acumulados y el año en cuestión se ajusta perfectamente a una ecuación polinómica de segundo grado, tal y como se observa en la gráfica de la Figura 1.

7.2. Valor Actual Neto (VAN)

Este indicador proporciona información acerca de la rentabilidad de la inversión. Se calcula como la diferencia entre los flujos de caja actualizados producidos por una inversión a una tasa prefijada de interés y las inversiones actualizadas, a esa misma tasa, que se requieren para realizar la inversión (8). Su valor se obtiene empleando la Ecuación 5.

$$VAN = \sum_{j=1}^{20} \frac{FC_j}{(1+i)^j} - K \quad \text{Ecuación 5}$$

Siendo FC_j los flujos de caja generados en el año “j”, K el pago de la inversión e i el tipo de interés expresado en tanto por uno. Se trata de una forma de estudiar la rentabilidad de un proyecto en términos absolutos netos, en otras palabras, indica el valor del proyecto a día de hoy.

Una inversión debe ser aceptada si el valor actual neto es positivo, pues generará beneficios y por tanto vale la pena efectuarla, y debe rechazarse en caso de resultar negativo. Para la inversión de estudio, se obtiene un VAN de **13.935.934,03 €** y, por consiguiente, se considera que el proyecto resulta rentable.

7.3. Tasa Interna de Retorno (TIR)

La Tasa Interna de Retorno es una medida comúnmente empleada en la evaluación de proyectos y está estrechamente relacionada con el VAN, esta se expresa en tanto por ciento. Es definida como el tipo de interés o la tasa de descuento que produce un VAN de cero, lo que viene a ser la tasa de actualización con la que es recuperada la inversión (9). No obstante, su cálculo se complica para altos números de períodos, pues la ecuación a resolver presentará un orden elevado. En este caso, su cálculo fue realizado en una hoja Excel por dos vías distintas: haciendo uso de la función pertinente (TIR) y empleando la herramienta *solver* para resolver la Ecuación 6.

$$0 = -I_0 + \sum_{j=1}^{20} \frac{FC_j}{(1 + TIR)^j} \quad \text{Ecuación 6}$$

Atendiendo a la regla de la TIR, una inversión es aceptable si la TIR excede la tasa de descuento seleccionada para el cálculo del VAN. De lo contrario debe rechazarse, pues no alcanza la rentabilidad mínima exigida. Para el proyecto de estudio se obtuvo una TIR del **15,6%**. Dado que la tasa de descuento aplicada para el VAN es del 10%, valor inferior a la tasa interna de retorno calculada, se determina que el proyecto es aceptable.

8. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

En último lugar, se lleva a cabo una evaluación de la estabilidad del proyecto ante la variación de diversos factores, con la finalidad de conocer si representan aspectos críticos en la rentabilidad y factibilidad de este.

El primer factor que será analizado es el coste de los reactivos. Este será variado en un porcentaje de ± 5 . Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 11. Como es de esperar, un aumento de su coste llevará a un incremento de los flujos de salida (es decir, los gastos) hasta tal punto que la inversión se vuelve inviable: el VAN es negativo, por lo que no será rentable, asimismo, en lo relativo al *payback*, el desembolso inicial realizado no será recuperado en la vida útil del proyecto.

Opuestamente, una disminución de la misma magnitud del coste de reactivos llevará a una mejora importante de los indicadores de rentabilidad de la inversión y la inversión inicial será recuperada en tan solo cuatro años.

Tabla 11. Resultados de rentabilidad al modificar el precio de los reactivos

Indicador	-5% coste reactivos	+5% coste reactivos
VAN	95.825.389,25 €	-67.953.521,18 €
TIR	44%	-
Payback	Año 3	Nunca

Otra variable considerada como crítica para el presente proyecto es el precio de comercialización del óxido de propileno. Para su evaluación, su valor se variará el mismo porcentaje que para el caso de los reactivos. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 12. Es posible observar cómo una disminución del 5% en su precio conllevará a que no resulte rentable su producción, no obstante, si el precio se incrementa ese mismo porcentaje, la inversión no solo pasa a ser rentable, sino que existe una mejora considerable en los indicadores económicos.

Tabla 12. Resultados de rentabilidad al modificar el precio del óxido de propileno

Indicador	-5% precio producto	+5% precio producto
VAN	-72.902.224,23 €	100.774.092,30 €
TIR	-	46%
Payback	Nunca	Año 3

La estimación del presupuesto, llevada a cabo en el *Documento V*, por su carácter preliminar, se clasificó dentro de la Clase IV. Para esta categoría, su precisión se sitúa en torno al $\pm 30\%$. Con el fin de determinar cómo afectarán las variaciones en los límites de dicho rango de precisión, se varía el valor de la inversión inicial esa magnitud. Los resultados obtenidos se recogen en la Tabla 13. Se observa que tanto para una variación positiva como negativa del 30%, la inversión continúa siendo rentable.

Tabla 13. Resultados de rentabilidad al modificar el total de la inversión inicial

Indicador	-30% inversión	+30% inversión
VAN	25.057.799,82 €	2.814.068,25 €
TIR	24%	10,9%
Payback	año 5	año 9

Por último, se realiza una variación de dos parámetros a la vez: los costes de los reactivos y el precio del producto. De esta forma, en la Tabla 14 se presentan los valores de los indicadores de rentabilidad al aumentar y disminuir en un 10% los datos base, siendo posible apreciar que ambos casos resultan rentables según estos criterios, resaltando que es más favorable la situación en la que se incrementen ambos datos.

Tabla 14. Resultados de rentabilidad al modificar a la vez el coste de reactivos y el precio del producto

Indicador	-10%	+10%
VAN	4.038.527,93 €	23.833.340,14 €
TIR	12%	19,3%
<i>Payback</i>	Año 9	Año 6

Finalmente, es posible determinar que los costes de los reactivos y los ingresos relativos al producto por sí mismos son variables fundamentales para la rentabilidad del proyecto. Con variaciones mínimas se consiguen cambios notables en los parámetros financieros. Sin embargo, al aplicar una modificación en conjunto de ambos valores, el resultado se torna favorable con cambios mucho menos drásticos, lo que determina que estos criterios van de la mano. Esta situación es común para la industria química, ya que los precios de los productos están estrechamente relacionados con los costes de los materiales de partida.

Por otro lado, a pesar de haber llevado a cabo una estimación de la inversión inicial con un amplio margen de error, se consiguió verificar que, aun en el peor escenario, el proyecto continúa siendo rentable, por lo que esta no supone una variable crítica sobre la rentabilidad del proyecto en cuestión.

9. BIBLIOGRAFÍA

1. **BBVA.** *¿Cómo funciona un préstamo francés?* [En línea] [Citado el: 16 de junio de 2020.] Disponible en: <https://www.bbva.es/finanzas-vistazo/ef/prestamos/frances.html>.
2. **ECONOMIPEDIA.** *Sistema de amortización francés.* [En línea] [Citado el: 16 de junio de 2020.] Disponible en: <https://economipedia.com/definiciones/sistema-de-amortizacion-frances.html>.
3. **TURTON, R. et al.** *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes.* 3ª edición. Nueva Jersey : Prentice Hall, 2009. ISBN 0-13-512966-4.
4. **DATOSMACRO.** *España-Salario Medio.* [En línea] [Citado el: 17 de junio de 2020.] Disponible en: <https://datosmacro.expansion.com/mercado-laboral/salario-medio/espana>.
5. **SY CORVO, Helmut.** LIFEDER. *Mano de Obra Indirecta: Características y Ejemplos.* [En línea] [Citado el: 17 de junio de 2020.] Disponible en: <https://www.lifeder.com/mano-obra-indirecta/>.
6. **FERNÁNDEZ, Rosa.** STATISTA. *Evolución de la variación de la media anual del índice de precios al consumo (IPC) en España de 2005 a 2019.* [En línea] 4 de junio de 2020. [Citado el: 17 de junio de 2020.] Disponible en: <https://es.statista.com/estadisticas/476953/tasa-de-inflacion-anual-en-espana/>.
7. **ROSS, Stephan A., Randolph W. WESTERFIELD y Bradford D. JORDAN.** *Fundamentos de Finanzas Corporativas.* Novena. Ciudad de Mexico : McGraw-Hill , 2014. ISBN: 978-607-15-0298-8.
8. **ECONOMIPEDIA.** *Comparación entre VAN y TIR.* [En línea] [Citado el: 17 de junio de 2020.] Disponible en: <https://economipedia.com/definiciones/comparacion-entre-van-y-tir.html>.
9. **ECONOMIPEDIA.** *Tasa interna de retorno (TIR).* [En línea] [Citado el: 17 de junio de 2020.] Disponible en: <https://economipedia.com/definiciones/tasa-interna-de-retorno-tir.html>.
10. **SINNOTT, Ray y Gavin TOWLER.** *Chemical Engineering Design.* Oxford : Butterworth-Heinemann, Elsevier, 2009. ISBN: 978-0-7506-8551-1.

DOCUMENTO II

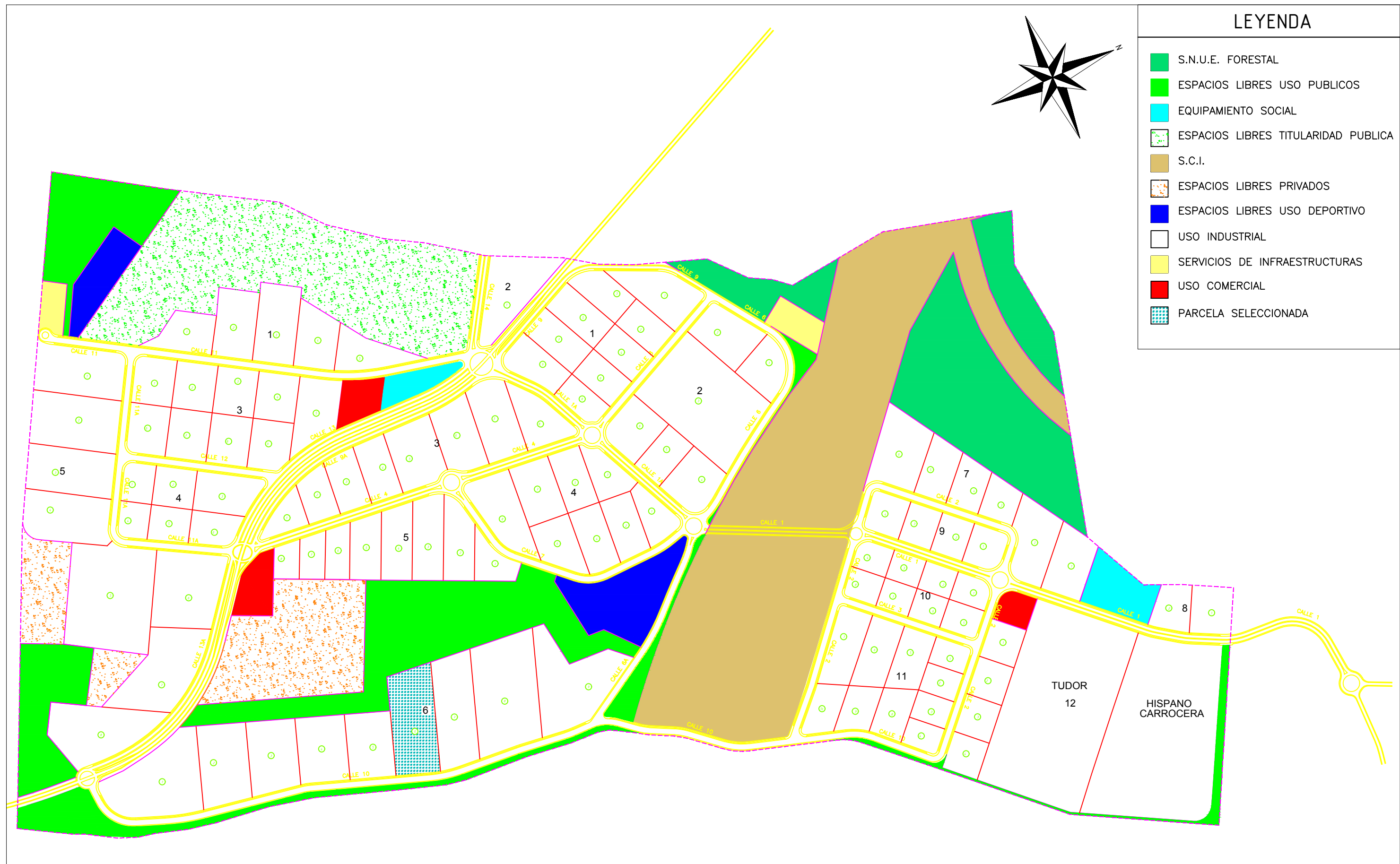
Planos

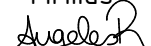
ÍNDICE

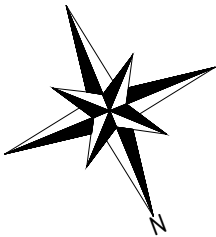
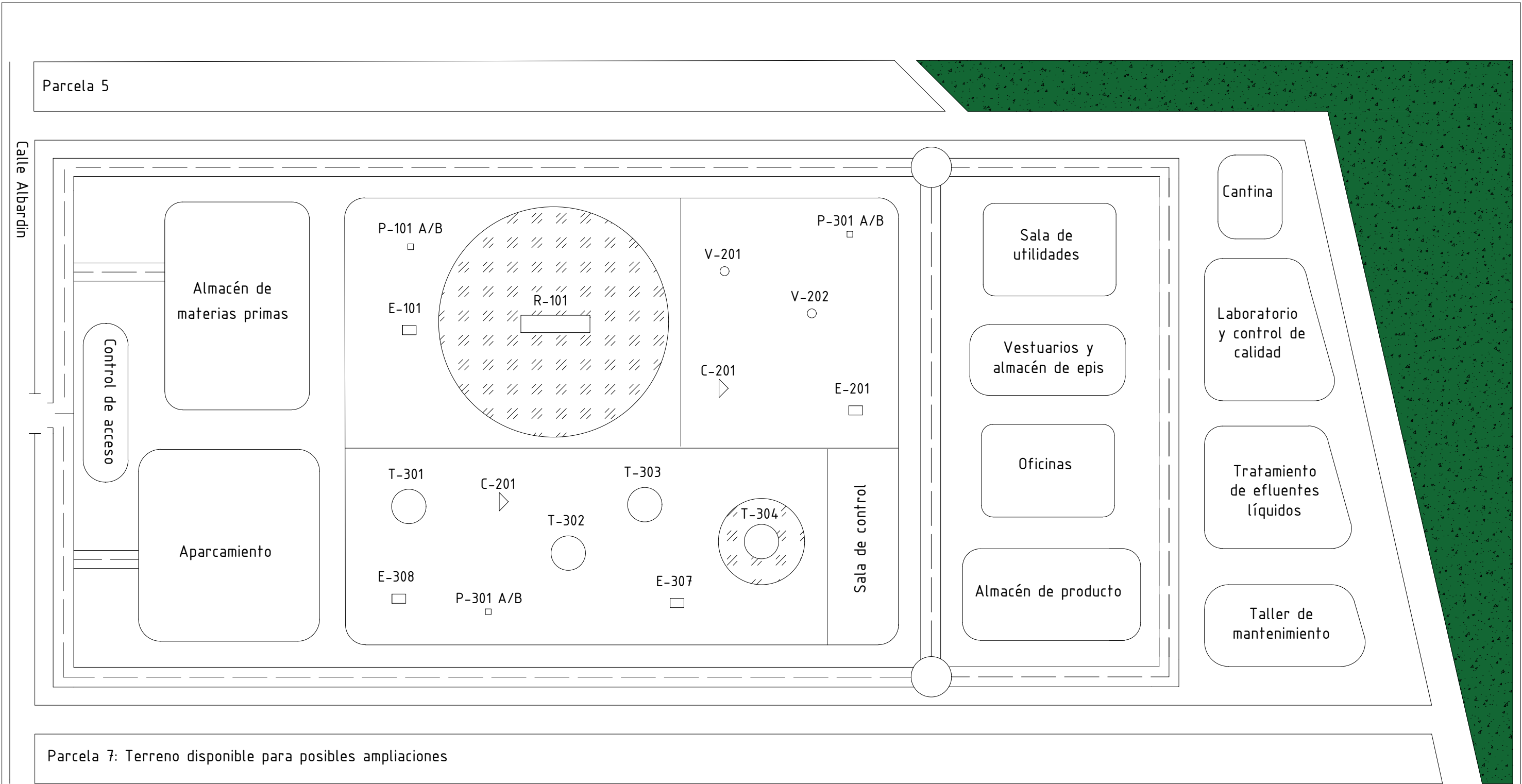
1. Plano de situación¹
2. Plano de emplazamiento²
3. Plano de implantación (*layout*)
4. Diagrama de flujo del proceso
5. Diagrama de instrumentación y control
6. Plano de diseño mecánico del reactor R-101
7. Plano de diseño mecánico de la columna T-304





¹ El plano de situación ha sido obtenido de la Sede Electrónica del Catastro de acceso libre y disponible en: <https://www.sedecatastro.gob.es/>

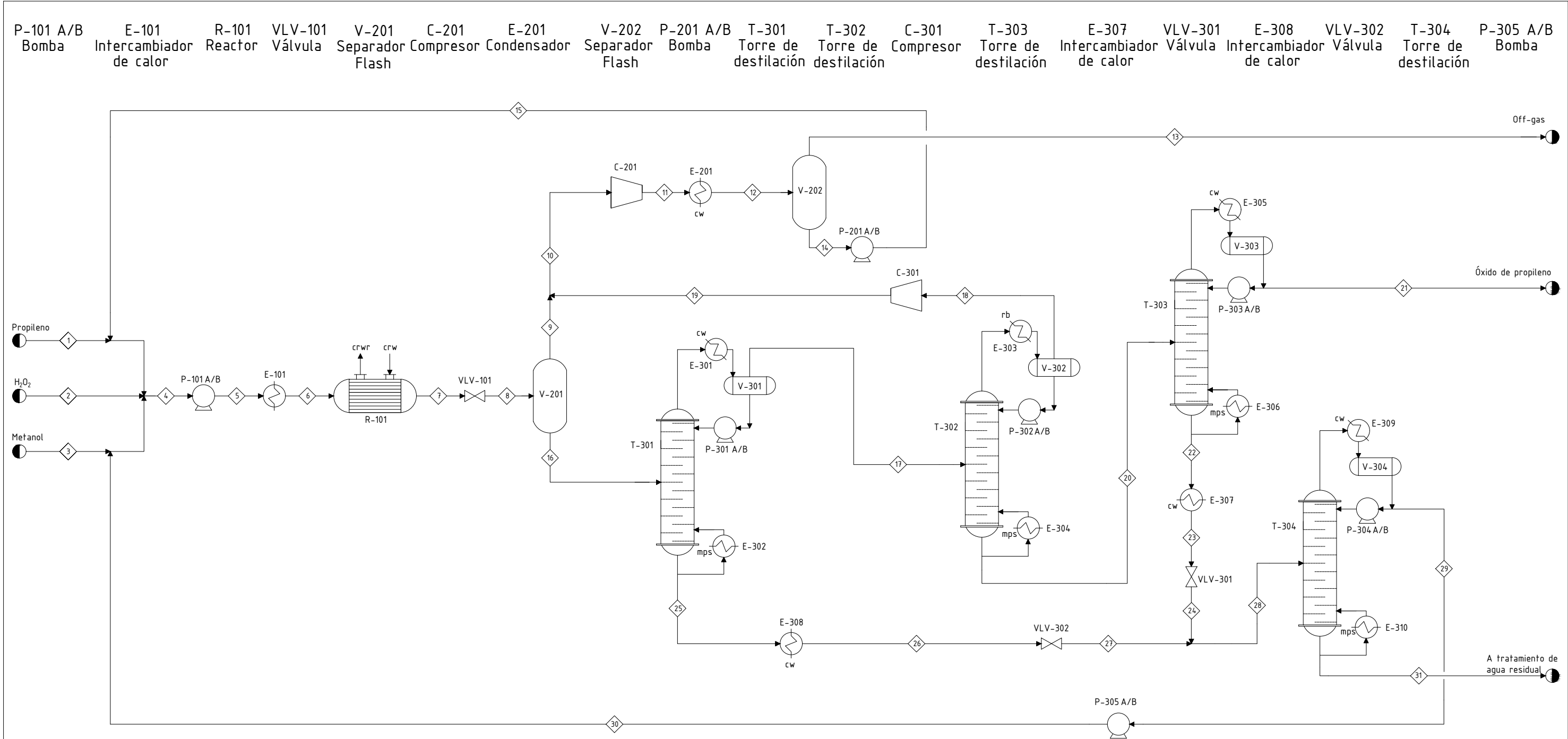
² El plano de emplazamiento se realizó a partir del modelo proporcionado por el Instituto Aragonés de Fomento, de acceso libre y disponible en: <https://www.iaf.es/admin/poligonos/ver.php?id=326>



Coordenadas geográficas		Datos descriptivos del inmueble		Fecha		Nombres		Firmas		ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA	
Esquina superior izquierda 41934'41,3" N; 0949'10,7"O	Esquina superior derecha 41934'38,8" N; 0948'59,9"O	Referencia catastral: 1853915XM8015D00011Y		Dibujado	02/04/20	Rodríguez Oreiro A. Teixeira Taboada S.					
Esquina inferior izquierda 41934'35,8" N; 0949'10,4"O	Esquina inferior derecha 41934'35,8" N; 0949'01,2"O	Localización: MANZ 6 PARC 6 50720 ZARAGOZA (ZARAGOZA)		Comprobado	12/06/20	Rodríguez Oreiro A. Teixeira Taboada S.					
		Superficie: 27.511 m2		Escala 1/1000	Nº de plano 2/7	PLANO DE EMPLAZAMIENTO Planta de Producción de Óxido de Propileno a partir de Peróxido de Hidrógeno					Hoja
									Sustituye a		
									Sustituido por		

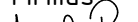



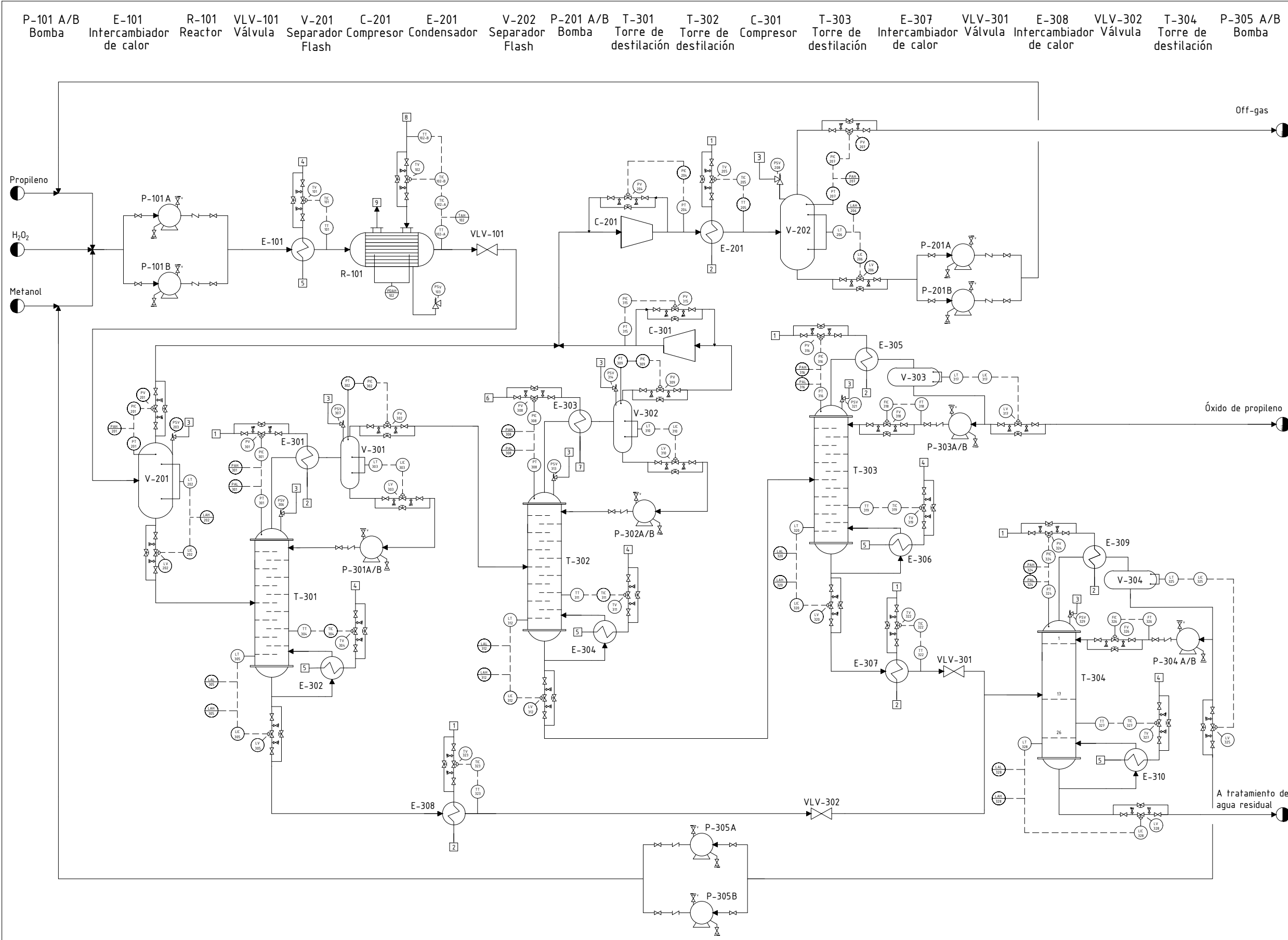
NOTAS		LEYENDA		Fecha		Nombres		Firmas		ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA	
Se consideraron las distancias mínimas de seguridad recomendadas por Global Asset Protection Services para plantas químicas		 Zona verde	Dibujado	03/06/20	Rodríguez Oreiro A. Teixeira Taboada S.		 				
			Comprobado	10/06/20	Rodríguez Oreiro A. Teixeira Taboada S.						
		Escala	Nº de plano	PLANO DE IMPLANTACIÓN Planta de Producción de Óxido de Propileno a partir de Peróxido de Hidrógeno						Hoja	
		1/1250	3/7							Sustituye a	
		 Área de exposición en caso de incendio o explosión			Sustituido por						



Corriente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
Temperatura (°C)	20.00	20.00	20.00	26.65	26.65	55.00	55.00	26.57	26.57	17.64	41.12	15.76	15.76	15.76	26.57	85.15	-9.64	7.13	97.23	73.19	101.70	68.34	68.34	117.90	68.34	68.34	64.65	64.65	99.60		
Presión (bar)	11.00	11.00	11.00	11.00	11.00	28.00	28.00	27.72	6.00	6.00	9.20	9.10	9.10	9.10	11.00	6.00	5.40	4.30	6.00	4.50	3.40	3.60	3.50	1.19	5.60	5.50	1.19	1.19	1.01	11.00	1.31
Fracción de vapor	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.21	1.00	1.00	1.00	0.06	1.00	0.00	0.00	0.00	1.00	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo másico total (kg/h)	19724.27	18943.36	97.78	212647.41	212647.41	212647.41	212647.41	212647.41	53609.95	99933.52	99933.52	99933.52	6070.11	93863.41	93863.41	159037.47	87921.64	46323.57	46323.57	41598.07	18939.39	22658.68	22658.68	22658.68	71115.82	71115.82	71115.82	93774.50	80018.59	80018.59	13755.91
Flujo molar total (kmol/h)	468.74	754.76	4.00	5967.08	5967.08	5967.08	5969.30	5969.30	1275.61	2376.48	2376.48	2376.48	145.21	2231.27	2231.27	4693.69	2139.91	1100.87	1100.87	1039.04	326.17	712.87	712.87	712.87	2553.78	2553.78	2553.78	3266.64	2508.31	2508.31	758.34
Flujo por componente (kmol/h)																															
Metanol	0.00	0.00	1.83	2500.00	2500.00	2500.00	2500.00	2500.00	15.00	15.00	15.00	15.00	0.06	14.95	14.95	2485.00	700.00	0.00	0.00	700.00	0.16	699.84	699.84	699.84	1785.00	1785.00	1785.00	2484.84	2483.22	2483.22	1.61
Agua	0.00	420.61	2.17	449.00	449.00	449.00	781.91	781.91	1.31	1.34	1.34	1.34	0.20	1.13	1.13	780.61	13.06	0.03	0.03	13.03	0.00	13.03	13.03	13.03	767.54	767.54	767.54	780.58	25.08	25.08	755.49
Propileno	468.74	0.00	0.00	2673.21	2673.21	2673.21	2345.97	2345.97	1245.15	2345.97	2345.97	2345.97	141.49	2204.47	2204.47	1100.83	1100.83	1100.82	1100.82	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Oxígeno	0.00	0.00	0.00	0.82	0.82	0.82	4.28	4.28	4.28	4.28	4.28	4.28	3.46	0.82	0.82	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Propilenglicol	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.23	1.23	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.23	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.23	1.23	1.23	1.23	0.00	0.00	1.23
Óxido de propileno	0.00	0.00	0.00	9.90	9.90	9.90	335.90	335.90	9.88	9.90	9.90	9.90	0.00	9.90	9.90	326.02	326.02	0.02	0.02	326.00	326.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Peróxido de hidrógeno	0.00	334.15	0.00	334.15	334.15	334.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

UTILIDADES
cw: Agua de refrigeración
mps: Vapor de agua de presión media
rb: Salmuera de refrigeración
crw: Agua refrigerada

	Fecha	Nombres	Firmas	ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
Dibujado	24/03/20	Rodríguez Oreiro A. Teixeira Taboada S.		
Comprobado	23/04/20	Rodríguez Oreiro A. Teixeira Taboada S.		
Escala S/E	Nº de plano 4/7	DIAGRAMA DE FLUJO Planta de Producción de Óxido de Propileno a partir de Peróxido de Hidrógeno		Hoja
				Sustituye a
				Sustituido por



PLANOS DE REFERENCIA

NOMENCLATURAS

- 1 AGUA DE REFRIGERACIÓN. ALIMENTACIÓN
- 2 AGUA DE REFRIGERACIÓN. RETORNO
- 3 ANTORCHA
- 4 VAPOR DE MEDIA PRESIÓN
- 5 VAPOR DE M.P. CONDENSADO
- 6 SALMUERA REFRIGERANTE. ALIMENTACIÓN
- 7 SALMUERA REFRIGERANTE. RETORNO
- 8 AGUA REFRIGERADA. ALIMENTACIÓN
- 9 AGUA REFRIGERADA. RETORNO

NOTAS

NOMENCLATURA

XXX ABB A: Sección del proceso
B: Nº del lazo

Primera letra (X)		Letras sucesivas (Y)	
D	Diferencial	T	Temperatura
F	Flujo	A	Alarma
L	Nivel	C	Controlador
P	Presión	T	Transmisor
		H	Alto
		V	Válvula
		I	Indicador

LEYENDA LÍNEAS



— Línea de proceso
--- Señal

LOCALIZACIÓN INSTRUMENTOS

○ Instrumento ubicado en planta
○ Instrumento ubicado en frente del panel en sala de control

VÁLVULAS

○ Válvula de control
○ Válvula de control manual
○ Válvula manual
○ Válvula antirretorno
○ V Venteo
○ Drenaje
○ Válvula de alivio

	Fecha	Nombres	Firmas  	ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA	
Dibujado	24/03/20	Rodríguez Oreiro A. Teixeira Taboada S.			
Comprobado	23/04/20	Rodríguez Oreiro A. Teixeira Taboada S.			
Escala S/E	Nº de plano 5/7	P&ID Planta de Producción de Óxido de Propileno a partir de Peróxido de Hidrógeno			Hoja Sustituye a Sustituido por

DATOS DE DISEÑO

CÓDIGO DE DISEÑO: ASME BPV SEC. VIII Div.I

MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN (CARCASA Y TUBOS)
ACERO INOXIDABLE AISI 304

SOPORTE TIPO SILLA DE MONTAR
ACERO INOXIDABLE AISI 304


NÚMERO DE TUBOS: 573
DISPOSICIÓN TRIANGULAR, ROTADO 60º

PESO MUERTO

VACÍO: 310,35 kN LLENO: 465,03 kN

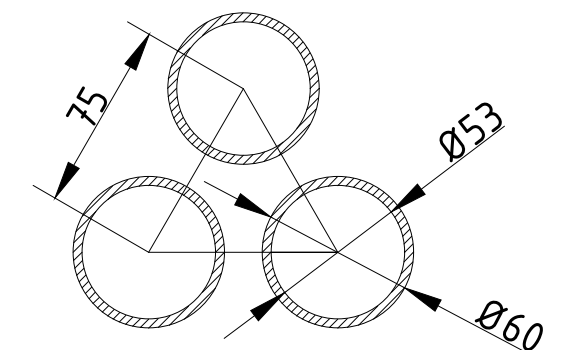
PARÁMETRO	VALOR
P operación, bar	28
T operación; ºC	55
Flujo másico, kg/h	212647,41
Masa catalizador, kg	6015
Fluido refrigerante	Agua refrigerada

LEYENDA

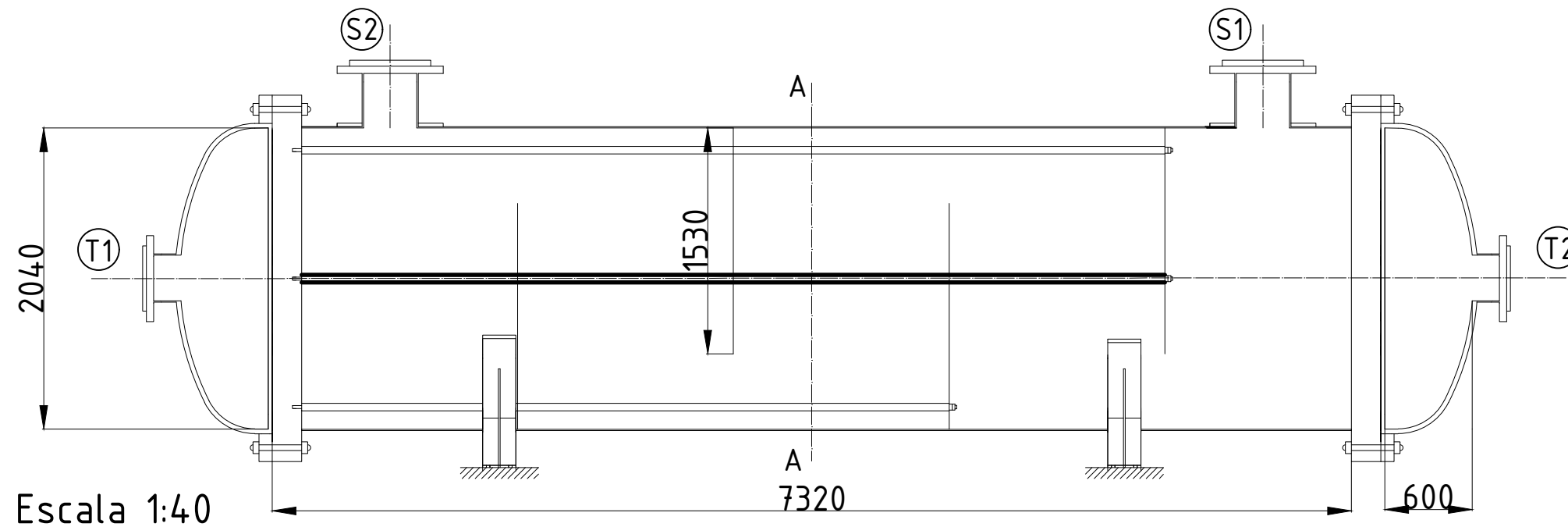
 Tubos rellenos de partículas de catalizador

NOTAS

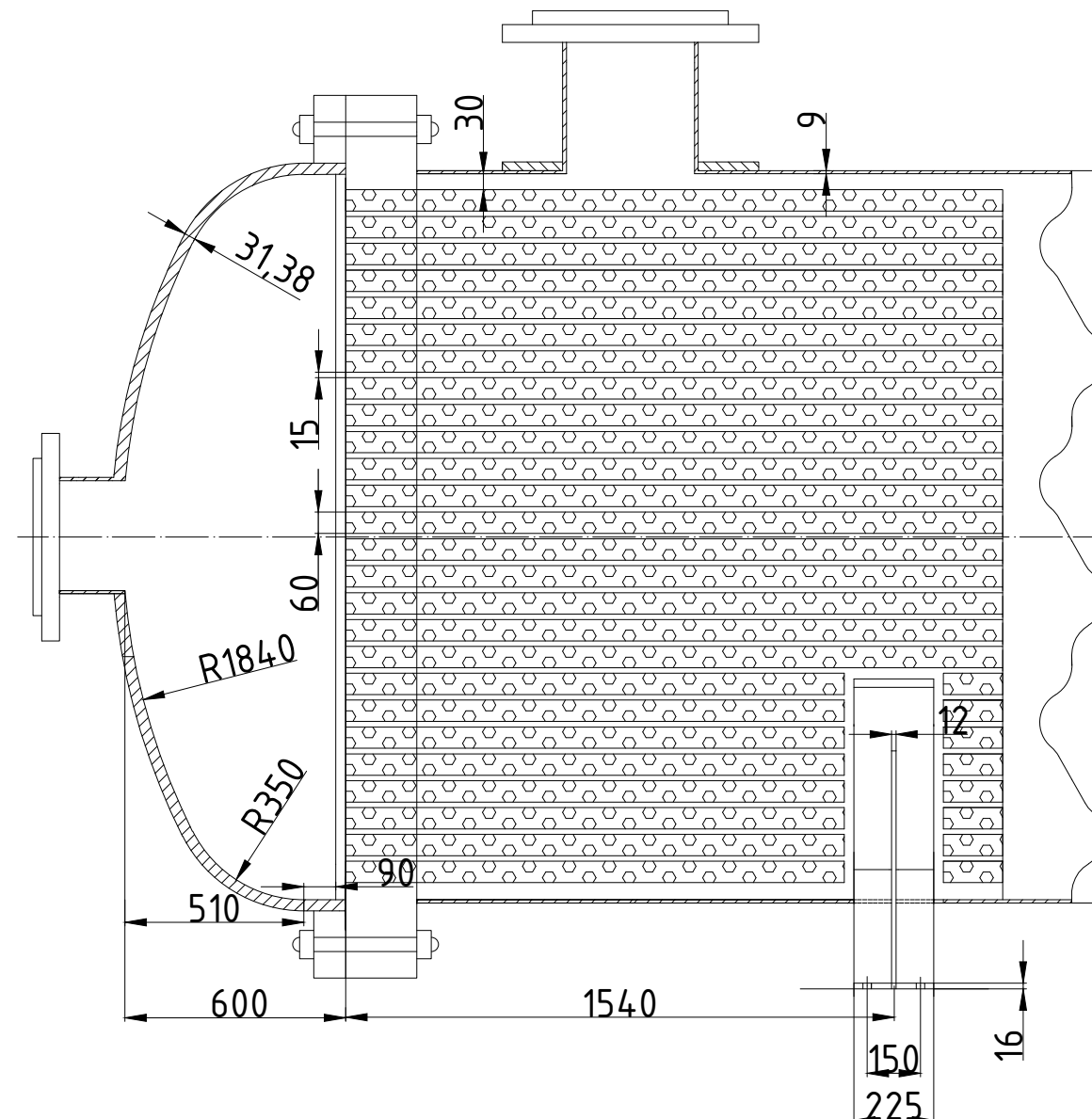
1. Todas las medidas se expresan en mm
2. T1 representa el orificio de entrada a tubos
3. T2 representa el orificio de salida de tubos
4. S1 representa el orificio de entrada a carcasa
5. S2 representa el orificio de salida de carcasa



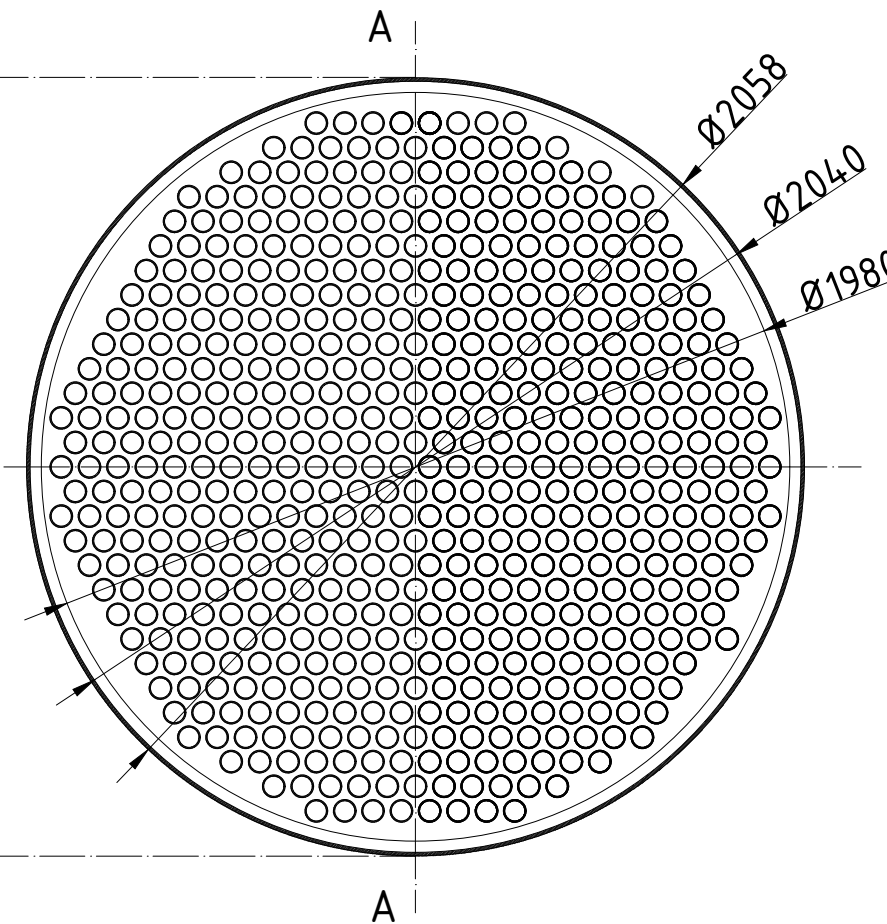
Escala 1:3



Escala 1:40



Escala 1:20



Dibujado	Fecha	Nombres	Firma
Comprobado	03/06/20	Teixeira Taboada, S.	<i>Sabell</i>
	10/06/20	Teixeira Taboada, S.	
Escala	Nº de plano	DISEÑO MECÁNICO:	
1: 20; 1: 40; 1: 3	6/7	REACTOR CATALÍTICO R-101	

ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA
GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA
UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

Hoja
Sustituye a
Sustituido por

DOCUMENTO III

Estudios con entidad propia

ÍNDICE

ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL

1. OBJETO.....	3
2. DESCRIPCIÓN GENERAL DEL PROYECTO	3
2.1. Resumen de las emisiones.....	5
2.2. Justificación de la ubicación	6
3. EVALUACIÓN DE LAS PRINCIPALES ALTERNATIVAS	6
3.1. Proceso clorhidrina (CHPO)	6
3.2. Procesos de coproducción	7
3.3. Proceso a partir de hidroperóxido de cumeno	7
3.4. Proceso a partir de peróxido de hidrógeno (HPPO)	7
3.5. Alternativa seleccionada	8
4. DESCRIPCIÓN DEL INVENTARIO AMBIENTAL E IDENTIFICACIÓN DE IMPACTOS.....	9
4.1. Medio físico	9
4.1.1. Clima.....	9
4.1.2. Calidad del aire.....	11
4.1.3. Geología e hidrología.....	13
4.1.4. Molestias inducidas por ruido	13
4.2. Medio biótico	15
4.2.1. Flora y fauna.....	15
4.2.2. Red Natura 2000.....	15
4.3. Medio socioeconómico y cultural	16
4.3.1. Población y empleo	16
4.3.2. Uso del suelo	18
4.3.3. Paisaje y patrimonio	18
4.4. Vulnerabilidad ante accidentes.....	18
5. IDENTIFICACIÓN Y VALORACIÓN DE IMPACTOS AMBIENTALES.....	19

5.1.	Matriz de Leopold	20
6.	MEDIDAS PARA LA MITIGACIÓN DE LOS IMPACTOS.....	22
6.1.	Medidas en la fase de construcción.....	22
6.2.	Medidas en la fase de operación	22
6.3.	Medidas en la fase de desmantelamiento	23
7.	PROGRAMA DE VIGILANCIA AMBIENTAL	23
8.	RESUMEN Y CONCLUSIONES	26
9.	BIBLIOGRAFÍA.....	27
ESTUDIO BÁSICO DE SEGURIDAD Y SALUD ¹		

¹ El Estudio Básico de Seguridad y Salud será presentado en el Archivo II del proyecto.

ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL

1. OBJETO

El Estudio de Impacto Ambiental es un documento que debe elaborar el promotor y acompañar al proyecto. En él se identificarán, describirán, cuantificarán y analizarán los posibles efectos sobre el medio ambiente que deriven de las fases de construcción, operación y desmantelamiento de la Planta de Producción de Óxido de Propileno. Así, también serán analizadas las diversas alternativas que sean técnica y ambientalmente viables, y se determinarán las medidas necesarias para la prevención, corrección y compensación de los efectos adversos sobre el medio ambiente.

La elaboración de este Estudio se rige por la Ley 21/2013, del 9 de noviembre, de evaluación ambiental, tomando en cuenta las modificaciones establecidas en la Ley 9/2018, de 5 de diciembre con las que se transpone la Directiva 2014/52/UE del Parlamento Europeo y del Consejo. En el Anexo I de esta Ley se recoge que aquellos proyectos donde haya instalaciones industriales pertenecientes al sector químico, petroquímico, textil o papelera (pertenecientes al Grupo 5), deberán ser sometidos a la evaluación ambiental ordinaria regulada en el título II, capítulo II, sección 1ª. Así, dentro del Grupo 5 se incluyen las “instalaciones para la producción a escala industrial de sustancias mediante transformación química o biológica, de productos químicos orgánicos”. Puesto que la Planta de Producción de Óxido de Propileno pertenece a esta categoría, debe realizarse la evaluación ambiental ordinaria. En el Artículo 35, y más ampliamente desarrollado en el Anexo VI, de la correspondiente Ley se presentan los distintos apartados que ha de contener dicha evaluación ambiental y que se incluyen en el presente Estudio.

2. DESCRIPCIÓN GENERAL DEL PROYECTO

El objetivo de la Planta de Producción de Óxido de Propileno es generar 150 kton/año de PO con una pureza del 99,97% en peso, a partir de la epoxidación del propeno con peróxido de hidrógeno. El corazón de este proceso comúnmente conocido como HPPO es el catalizador empleado: una zeolita del tipo silicalita de titanio (TS-1), pues con ella se alcanzan una alta selectividad a PO y conversiones del peróxido superiores al 95%. Se trata de un proceso continuo en el que la planta opera 330 días al año las 24 horas diarias.

El proceso puede dividirse en tres secciones: acondicionamiento de materias primas y reacción, separación y recirculación del propileno y, por último, purificación del óxido de propileno y recirculación del metanol. A continuación, se hace un breve resumen.

El proceso da comienzo en la sección 100, donde se introducen las materias primas suministradas por proveedores externos en las proporciones adecuadas y se juntan con los productos recirculados, principalmente propileno y metanol, este último compuesto es empleado como

disolvente. Tras realizar su acondicionamiento, se introducen en un reactor catalítico multitubular de lecho fijo que opera en régimen isotérmico a una temperatura de 55 °C y 28 bar de presión.

La sección 200 se centra en el reaprovechamiento del propileno no reaccionado, pues esta olefina fue empleada como reactante en exceso. Con una válvula se descomprime la corriente de salida del reactor y se separa en un tanque flash, obteniendo una fase gaseosa rica en propeno. Esta corriente se junta con otra también en fase gaseosa y rica en propeno que procede del destilado de una de las columnas de la sección 300. La corriente resultante se comprime y posteriormente se condensa parcialmente para su separación en un segundo flash donde se obtiene por la parte superior una corriente de *off-gas* (compuesta por el oxígeno originado por la descomposición del peróxido de hidrógeno y una pequeña cantidad de propeno), la cual es retirada y enviada a los límites de batería del proceso. La corriente líquida obtenida es recirculada a la sección 100.

Finalmente, en la sección 300 es donde será posible alcanzar el elevado grado de pureza de óxido de propileno exigido. Asimismo, tendrá lugar la separación y posterior recirculación del metanol empleado como disolvente. El líquido obtenido a la salida del primer flash de la sección 200 es transferido a un tren de columnas de destilación. La primera columna es la preseparadora, donde se efectúa la separación del óxido de propileno y el propileno de la mayor parte del agua y el metanol. A continuación, una segunda columna de destilación se encarga de la retirada del propeno restante, que es el enviado a la sección 200. El producto de colas de esta columna, compuesto mayoritariamente por óxido de propileno y metanol, se destina a la torre de destilación donde se realiza la purificación que permite al destilado de PO cumplir con los requerimientos de pureza y retirarlo hacia el límite de batería como producto final. Por último, las corrientes obtenidas por la salida inferior de la primera y tercera columna, compuestas principalmente de metanol y agua, son separadas en una última columna de destilación donde se alcanza una elevada eficiencia en la recuperación del metanol de entrada, el cual es retirado en la corriente de destilado y recirculado a la sección de reacción. El producto obtenido por colas en esta última columna de destilación, compuesto mayoritariamente por agua y algunas trazas de propilenglicol se envía a los límites de batería para su posterior tratamiento. De esta forma, se obtienen tres corrientes de salida del proceso: una de *off-gas*, una de PO con la pureza requerida y una formada por agua y trazas de metanol y propilenglicol, la cual es enviada a tratamiento de residuos.

En esta planta son consumidos diferentes recursos y utilidades. Las materias primas consumidas son el propeno y el peróxido de hidrógeno. Debido al empleo del propeno en una proporción en exceso respecto al peróxido, este es recirculado a la entrada del proceso para su reaprovechamiento. Del mismo modo, se emplea metanol como disolvente, por consiguiente, al no reaccionar y tras un proceso de separación, se reutiliza y solo es necesaria la introducción de una pequeña corriente para suplir las mínimas pérdidas. Asimismo, son requeridas múltiples

utilidades para los distintos equipos de la planta: intercambiadores, condensadores y calderas de las columnas de destilación y para el reactor. Así, se emplea agua de refrigeración, agua refrigerada, vapor de media presión y salmuera refrigerante. La operación de la planta también conlleva un gasto energético importante pues se requiere electricidad para el funcionamiento de dos compresores, siete bombas, así como para la posible generación de aire comprimido de ser requerido en instrumentación.

2.1. Resumen de las emisiones

La Planta de Producción de Óxido de Propileno produce una serie de efectos ambientales como consecuencia de sus emisiones. Estas se exponen a continuación.

- Emisiones de gases: aunque las materias primas empleadas entran al proceso en estado líquido, la descomposición del peróxido de hidrógeno conlleva la formación de oxígeno gas, la mayor parte de este será extraído por la corriente de *off-gas* obtenida por la parte superior del segundo flash (V-202) y que será enviada a antorcha, pues también contiene propeno, emitiéndose a atmósfera dióxido de carbono. Asimismo, el propeno y óxido de propileno son compuestos altamente volátiles que se encuentran en estado gas en varias de las corrientes de las secciones 200 y 300, por consiguiente, debe tenerse en cuenta su posible emisión en caso de fugas. Además, la producción de vapor de media presión empleado en las calderas conlleva emisiones originadas por la combustión del gas natural. Debe mencionarse que la utilización de agua refrigerada está vinculada también a emisiones gaseosas indirectas. Por consiguiente, el empleo de estas utilidades acarrea emisiones de dióxido de carbono, metano y óxido nitroso, todos ellos gases de efecto invernadero (1).
- Efluentes líquidos: el proceso objeto de este Estudio no genera corrientes contaminadas, sin embargo, sí es producida una corriente de agua residual procedente de la salida por colas de la columna de destilación metanol/agua y, por tanto, debe enviarse a tratamiento. Del mismo modo, el agua derivada de operaciones de limpieza y mantenimiento de equipos, así como las aguas pluviales y sanitarias, deben ser recogidas y tratadas.
- Residuos: se puede diferenciar en peligrosos e inertes. El primer grupo engloba a aquellos derivados de la propia actividad de la planta, siendo el caso del catalizador al final de su vida útil. El segundo grupo comprende los residuos que no experimentan transformación física, química o biológica alguna y están vinculados a la fase de construcción y aquellos procesos de mantenimiento que impliquen obras (escombros, vidrio, materiales cerámicos como tejas y ladrillos, restos de hormigón...).
- Ruido: la mayoría de las industrias son susceptibles de generar ruido en su entorno debido a su actividad. Las principales fuentes de contaminación acústica de la planta tienen como origen los equipos mecánicos, es decir, bombas y compresores. Para regular la calidad del

entorno acústico, desde el punto de vista medioambiental, en el año 2003 fue establecida en el BOE la ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido.

2.2. Justificación de la ubicación

Fue seleccionado el polígono industrial Empresarium, localizado en las inmediaciones de Zaragoza, como emplazamiento de las instalaciones de la Planta de Producción de Óxido de Propileno. Se trata de un enclave estratégico, pues en sus alrededores existe disponibilidad de suministro de las materias primas necesarias, así como por su proximidad a mercados de consumo. Es posible su acceso por la carretera provincial CV-624.

Cabe destacar que Zaragoza cuenta con aeropuerto y pertenece a la red de trenes de Alta Velocidad (AVE). Pese a no disponer de costa, dispone de una terminal marítima (tmZ), en otras palabras, una intermodal de mercancías que conecta, a través de la red ferroviaria, un punto del interior con los puertos marítimos de origen o destino de los tráficos tratados. Así, está conectada permanentemente con los principales puertos de España (Bilbao, Valencia y Barcelona). En cuanto a las conexiones por carretera, Zaragoza conecta con Barcelona y Bilbao por las autopistas AP-2 y AP-68 respectivamente. Asimismo, está comunicada con ciudades como Madrid, Huesca, Teruel y Valencia mediante las autovías A-2 y A-23. Está conectada con una red de carreteras nacionales, tales como la N-II Madrid-Zaragoza-Barcelona, la N-330 Levante a Francia por Zaragoza y la N-232 Santander-Logroño-Zaragoza-Vinaroz (2).

3. EVALUACIÓN DE LAS PRINCIPALES ALTERNATIVAS

En las próximas líneas se hará referencia a las distintas alternativas de procesos de producción de óxido de propileno que fueron estudiadas, hasta finalmente determinar que la solución adoptada sería la de fabricación de PO mediante el proceso con peróxido de hidrógeno (HPPO). Estas se suelen clasificar según el compuesto que reacciona con el propileno.

3.1. Proceso clorhidrina (CHPO)

En esta reacción, el propileno reacciona con ácido hipocloroso para producir clorhidrina. Este compuesto es posteriormente deshidroclorinado empleando una solución acuosa de hidróxido de potasio para producir el producto deseado (PO). Principalmente, como subproductos se forman 1,2-dicloropropano y pequeñas cantidades de dicloropropanoles. Hay que destacar también la formación de éteres de dicloroisopropil. Al momento de llevar a cabo la deshidrocloración, es necesario el empleo de una base, usualmente se utiliza hidróxido de calcio. Los hidrocarburos clorhinados, la salmuera, los glicoles de propileno, entre otros subproductos, deben ser eliminados del proceso. La cantidad de salmuera producida es en torno a 40 veces el óxido de propileno obtenido, y al no tener ningún valor comercial, se torna una desventaja tanto en el ámbito económico como en el medioambiental (3). Además, aparte de la producción de altas cantidades

de agua residual y sales, el proceso de la clorhidrina tiene una importante huella ecológica, debido al alto uso de electricidad para generar cloruros.

3.2. Procesos de coproducción

En estos procesos se obtienen, en conjunto con el PO, otros compuestos de interés. Existen dos alternativas que son las actualmente utilizadas, coproduciendo monómero de estireno (SM) o alcohol terbutílico (TBA). Esta ruta de producción consiste en hacer reaccionar un peróxido orgánico para manufacturar PO por epoxidación de propileno. A su vez, se produce el alcohol correspondiente como coproducto (4). Los procesos de hidroperóxido se caracterizan por ser selectivos y por producir muchos menos desechos que el de clorhidrina. No obstante, tienen una desventaja inherente, pues la producción es codependiente, es decir, no se puede fabricar un producto sin elaborar el otro también. La proporción del coproducto suele ser de 2 a 4 veces mayor a la de PO, por lo que, en el caso de una disminución de demanda se encontraría un inconveniente de exceso de productos no deseados. Asimismo, en esta alternativa es usual emplear catalizadores homogéneos para llevar a cabo la reacción de epoxidación, provocando un problema de separación y posterior desecho de estos (3).

3.3. Proceso a partir de hidroperóxido de cumeno

Este método fue desarrollado por una compañía química japonesa y puesto en marcha por primera vez en 2003 (5). Se compone de tres etapas reactivas, una de regeneración del hidroperóxido de cumeno por la oxidación del cumeno empleando aire, un proceso de epoxidación del propileno utilizando hidroperóxido de cumeno, y una etapa para la recuperación de cumeno por hidrogenación de alcohol α -cumyl formado en el proceso de epoxidación (4). Este proceso se caracteriza por un elevado rendimiento en la formación de óxido de propileno gracias a la alta eficacia del catalizador empleado y un consumo energético mucho menor que otros procesos en las etapas de separación y purificación del PO obtenido.

3.4. Proceso a partir de peróxido de hidrógeno (HPPO)

Este proceso consiste en la producción PO a partir de propileno y peróxido de hidrógeno, haciendo uso de un catalizador heterogéneo de silicalita de titanio TS-1. Uno de los mayores atractivos de este proceso es su simplicidad, al tener lugar una reacción en una sola etapa. Asimismo, este genera como coproducto exclusivamente agua, la cual es posteriormente tratada y descargada. De esta forma, se evitan los problemas relativos al tratamiento de subproductos clorinados y copiosas cantidades de aguas residuales que aparecen en el proceso de clorhidrina (6). Igualmente, con esta alternativa se consigue un proceso más rentable, especialmente considerando los costes de inversión de capital. Es un método respetuoso con el medioambiente y altamente eficiente en el ámbito ecológico. El proceso se despliega en una etapa de reacción, otra de descompresión y separación de propileno, otra de purificación de PO, y, por último, la de separación metanol/agua.

En la etapa de reacción, con el fin de aumentar la selectividad y la conversión del peróxido de hidrógeno, se opera con un exceso de propeno. El propileno no reaccionado en el reactor es recirculado al inicio del proceso para un completo aprovechamiento de este compuesto (7).

3.5. Alternativa seleccionada

El método de la clorhidrina es el primer proceso con el que se logró producir PO, sin embargo, se ha determinado que, de todas, es la alternativa con la mayor huella medioambiental, debido a la enorme cantidad de agua residual repleta de sales de cloro e hidrocarburos que se genera, así como al elevado uso de electricidad para generar cloruros. Por todo esto, la alternativa no se considera apropiada para este proyecto.

Respecto a los procesos de coproducción con estireno y alcohol terbutílico, aunque su desarrollo tiene asociados impactos ambientales mucho menores a los del método anterior, tienen la característica de ser rentables en el ámbito económico solo cuando ambos productos tienen una alta demanda en el mercado. No obstante, al ser generada de 2 a 4 veces más cantidad de coproducto que de óxido de propileno, y tener dos mercados distintos y desligados entre sí a los que satisfacer, es muy probable que en algún momento se desbalanceen las demandas de las dos sustancias, lo cual genera una situación inestable y de incertidumbre de cara al futuro. De esta manera, se descarta esta opción para la planta en cuestión.

Al igual que el de HPPO, el proceso de producción de óxido de propileno a partir de cumeno destaca por producir exclusivamente PO. Además, tiene un menor impacto ambiental y consumo energético que los procesos de generaciones previas. Sin embargo, un inconveniente fundamental a destacar es el poco tiempo que tiene de implementada esta tecnología, por lo que no es una alternativa de la que se disponga de suficiente información acerca del proceso y sus impactos en el ambiente. Por esta razón no se asume apropiada para el proyecto a realizar.

Finalmente, la alternativa de HPPO es la seleccionada para el diseño de la planta de producción de óxido de propileno que se construirá, debido a numerosas razones favorables con respecto a los demás métodos. Los documentos BREF (Best available techniques Reference document), publicados por la Comisión Europea, donde se publican las Mejores Técnicas Disponibles de la industria establecen que, comparado con otras tecnologías existentes de producción de PO, la alternativa de HPPO reduce la proporción de agua residual un 80% y utilización de agua un 35%, disminuyendo además la huella física causada por la infraestructura, al incorporar integración de materiales de partida y la ausencia de coproductos. Añaden, además, que esta ruta conduce a la menor huella ecológica. Asimismo, el proceso se caracteriza por tener un alto rendimiento en la producción de PO, con bajos costes de inversión y consumo energético (8). Por todo esto, se decide que se trata de la mejor opción para implementar una nueva planta productiva y será la base del desarrollo de este proyecto.

4. DESCRIPCIÓN DEL INVENTARIO AMBIENTAL E IDENTIFICACIÓN DE IMPACTOS

En este apartado se procederá al estudio del estado del lugar y de sus condiciones ambientales antes de la realización de las obras para la instalación de la Planta de Producción de PO que puedan verse afectadas por el proyecto. Se describirán los parámetros englobados dentro de los distintos factores considerados a continuación y se comentarán posibles impactos que pueda haber sobre ellos debido a la construcción de la instalación industrial. Asimismo, se incluirá una evaluación de las repercusiones del proyecto sobre espacios pertenecientes a la Red Natura 2000.

4.1. Medio físico

En las próximas líneas serán comentados los aspectos físicos susceptibles a la implantación de las instalaciones industriales.

4.1.1. Clima

El clima se define como el conjunto de variables atmosféricas (precipitaciones, temperatura, vientos...) que caracterizan una región y cuya acción compleja tiene una influencia directa en la existencia de los diferentes seres sometidos a ella. La climatología es la disciplina encargada del estudio del clima, esta trata de buscar regularidades en las variables atmosféricas elaborando promedios y empleando estadísticas que permitan predecir las tendencias climáticas de cada lugar. Así, es necesario analizar los valores recogidos a lo largo de varios años.

La AEMET es la Agencia Estatal de Meteorología y pone a disposición pública datos históricos de diferentes variables meteorológicas a lo largo del territorio español. Para determinar el clima en la zona donde se ubica la Planta de Producción de PO se emplearon los datos recogidos de 1981 a 2010 por dicha Agencia en la estación meteorológica Zaragoza-Aeropuerto, pues es una de las estaciones próximas al Polígono Empresarium, los cuales son plasmados en la Tabla 1.

Tabla 1. Valores climatológicos normales en Zaragoza. Periodo 1981-2010. Fuente: (9)

Mes	R	H	DR	DN	DT	DF	DH	DD	I
Enero	21	75	4.0	0.7	0.0	6.5	7.6	4.6	131
Febrero	22	67	3.9	0.4	0.1	2.9	5.2	5.1	165
Marzo	19	59	3.7	0.2	0.3	0.4	1.4	6.7	217
Abril	39	57	5.7	0.0	1.4	0.2	0.1	4.6	226
Mayo	44	54	6.4	0.0	4.1	0.3	0.0	4.5	274
Junio	26	49	4.0	0.0	3.9	0.1	0.0	8.2	307
Julio	17	47	2.6	0.0	3.8	0.0	0.0	14.6	348
Agosto	17	51	2.3	0.0	3.7	0.0	0.0	10.9	315
Septiembre	30	57	3.2	0.0	2.8	0.2	0.0	8.0	243
Octubre	36	67	5.4	0.0	1.0	1.0	0.0	5.4	195
Noviembre	30	73	5.1	0.1	0.1	3.9	1.9	4.0	148
Diciembre	21	76	4.8	0.5	0.1	7.1	6.5	4.3	124
Año	322	61	51.1	2.4	21.3	22.5	23.1	81.6	-

Donde el significado de las siglas es **R**: precipitación media (mm), **H**: humedad relativa media (%), **DR**: número medio de días de precipitación superior o igual a 1 mm, **DN**: número medio de días de nieve, **DT**: número medio de días de tormenta, **DF**: número medio de días de niebla, **DH**: número medio de días de helada, **DD**: número medio de días despejados, **I**: número medio de horas de sol.

El clima de Zaragoza está condicionado por su ubicación en la depresión del río Ebro, por lo que presenta una gran heterogeneidad en comparación con el resto de Aragón. En el valle medio del Ebro el clima es continental, con marcados contrastes térmicos y escasez de lluvias; lo que se traduce en una vegetación seca. En Zaragoza, aguas abajo del río Ebro sopla del noroeste (NW) un viento frío, seco y a rachas, denominado Cierzo o, por el contrario, aguas arriba del río, del sureste (SE), se presenta un viento templado y húmedo, que trae consigo los temporales de lluvia, aunque estos son escasos.

La temperatura anual media en esta ciudad es de 15,5°C. La estación más fría del año es el invierno, especialmente el mes de enero, mientras que el más cálido es el mes de julio. En la Figura 1 se presenta una gráfica que recoge los valores medios mensuales de las temperaturas en Zaragoza.

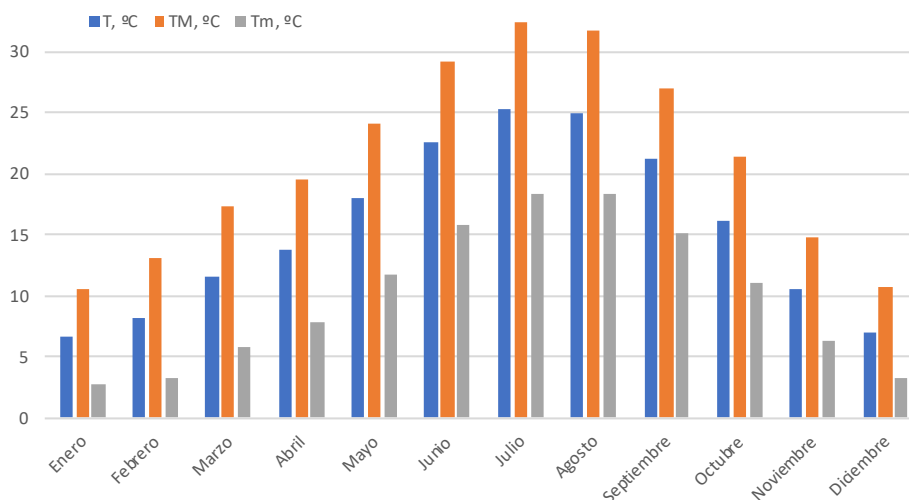


Figura 1. Temperatura: media (azul), máxima diaria (naranja) y mínima diaria (gris) en Zaragoza. Fuente: elaboración propia a partir de (9)

En el valle medio del Ebro se producen pocas precipitaciones. Estas van descendiendo desde los bordes montañosos hacia el valle. Las épocas donde hay más lluvias son la primavera y otoño. Los días con precipitación mayor o igual a 1 mm son de media 51,1. Por otro lado, en la región son frecuentes las tormentas estivales, teniendo lugar aproximadamente 21,3 días al año. A su vez, las horas de sol despejado en el valle del Ebro son elevadas, ya que las nubes son barridas rápidamente por el cierzo, los días despejados son aproximadamente 82 (10).

4.1.2. Calidad del aire

La calidad del aire es un factor de gran relevancia y su evaluación, gestión y mejora se encuentran recogidos dentro de la legislación estatal, en el Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire y modificado por el Real Decreto 678/2014, de 1 de agosto y posteriormente por el Real Decreto 39/2017, de 27 de enero. Entre los objetivos de este RD se encuentra “definir y establecer objetivos de calidad del aire, de acuerdo con el anexo III de la Ley 34/2007, con respecto a las concentraciones de dióxido de azufre, dióxido de nitrógeno y óxidos de nitrógeno, partículas, plomo, benceno, monóxido de carbono, ozono, arsénico, cadmio, níquel y benzo(a)pireno en el aire ambiente”.

En el Artículo 2 de dicho RD se define contaminante como “cualquier sustancia presente en el aire ambiente que pueda tener efectos nocivos sobre la salud humana, el medio ambiente en su conjunto y demás bienes de cualquier naturaleza”. Asimismo, en el Anexo I se presentan los valores límite de los distintos contaminantes considerados para la protección de la salud y nivel crítico para la protección de la vegetación. Estos valores se expresan en $\mu\text{g}/\text{m}^3$ y el volumen es referido a una temperatura de 293 K y presión atmosférica. Los valores límites anuales se recogen en la Tabla 2.

Tabla 2. Valores límite para los distintos contaminantes del aire. Fuente: RD 102/2011, de 28 de enero

Contaminante	Período promedio	Valor, $\mu\text{g}/\text{m}^3$
Dióxido de azufre	24 horas	125, no podrá superarse más de 3 veces al año
Dióxido de nitrógeno	1 hora	200, no podrá superarse más de 18 veces al año
Partículas PM10	24 horas	50
Partículas PM2,5	1 año	25
Plomo	1 año	0,5
Benceno	1 año	5
Monóxido de carbono	8 horas	10000
Ozono troposférico	8 horas	120, no podrá superarse más de 25 días al año
Arsénico	1 año	0,006
Cadmio	1 año	0,005
Níquel	1 año	0,02
Benceno(a)Pireno	1 año	0,001

Es habitual el empleo del índice diario de calidad del aire (IDCA) para informar de una manera rápida e intuitiva sobre el estado en que se encuentra el aire en una determinada zona. Se trata de un valor adimensional calculado empleando la información que procede de la legislación vigente y teniendo en cuenta los efectos perjudiciales para la salud de los distintos contaminantes atmosféricos. Para calcular dicho índice se tienen en cuenta los siguientes contaminantes: dióxido de azufre, dióxido de nitrógeno, monóxido de carbono, partículas en suspensión PM10 y el ozono. El índice tiene un valor asignado de forma que, cuanto mayor sea su magnitud, peor será la calidad

del aire (11). El conjunto de valores de dicho índice se divide en cuatro tramos y a cada uno está asociado a un estado distinto de la calidad del aire, tal y como se observa en la Figura 2.

ICA	Calidad del Aire	Proteja su Salud
0 - 50	Buena	No se anticipan impactos a la salud cuando la calidad del aire se encuentra en este intervalo.
51 -100	Moderada	Las personas extraordinariamente sensitivas deben considerar limitación de los esfuerzos físicos excesivos y prolongados al aire libre.
101-150	Dañina a la Salud de los Grupos Sensitivos	Los niños y adultos activos, y personas con enfermedades respiratorias tales como el asma, deben evitar los esfuerzos físicos excesivos y prolongados al aire libre.
151-200	Dañina a la Salud	Los niños y adultos activos, y personas con enfermedades respiratorias tales como el asma, deben evitar los esfuerzos excesivos prolongados al aire libre; las demás personas, especialmente los niños, deben limitar los esfuerzos físicos excesivos y prolongados al aire libre.
201-300	Muy Dañina a la Salud	Los niños y adultos activos, y personas con enfermedades respiratorias tales como el asma, deben evitar todos los esfuerzos excesivos al aire libre; las demás personas, especialmente los niños, deben limitar los esfuerzos físicos excesivos al aire libre.
300+	Arriesgado	

Figura 2. Rangos del índice de calidad del aire. Fuente: (12)

Las emisiones de la Planta de HPPO, como fue comentado en el apartado de emisiones de gas en el punto 2.1. *Resumen de las emisiones*, proceden de la combustión de la corriente *off-gas*, obteniendo como productos dióxido de carbono y agua. Asimismo, pueden existir pequeñas emisiones indirectas de dióxido de carbono, metano y óxido nitroso asociadas a la generación de utilidades como el vapor de media presión y el agua refrigerada. En la Figura 3 se muestran las medidas de la calidad del aire en el entorno de Zaragoza.

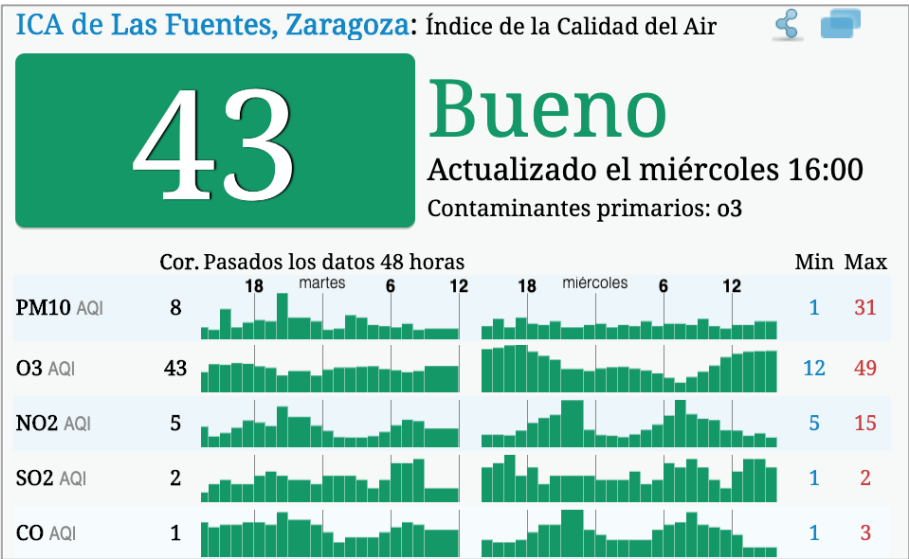


Figura 3. Calidad del aire en Zaragoza. Fuente: (12)

Se observa que todos los valores son inferiores a los límites establecidos y el IDCA se corresponde con el valor 43, por lo que la calidad del aire de la zona puede ser calificada como buena,

existiendo margen para el cumplimiento de los valores límites una vez dé comienzo la operación de la Planta.

4.1.3. Geología e hidrología

El relieve aragonés se caracteriza por un fuerte contraste altitudinal dado que se pueden encontrar cotas que superan los 3400 m sobre el nivel del mar y otras de menos de 100 m como las del bajo Ebro. El Polígono Empresarium se ubica a poco más de 3 km del río Ebro. Dentro de las grandes unidades del relieve en Aragón que tradicionalmente son identificadas, su localización se enmarca en la depresión del Ebro. Esta cuenca es una amplia unidad que limita al norte con los Pirineos, al sur con la Cordillera Ibérica y al este con la Cadena Costera Catalana. Es recorrida por el Ebro, en el que desembocan los numerosos ríos procedentes de las unidades montañosas de las proximidades. En la composición geológica dominan los sedimentos terciarios (13).

Al atravesar los distintos sedimentos terciarios, la acción fluvial dio origen a una erosión selectiva. Por un lado, las zonas formadas por los materiales más blandos han sido sobreexcavadas formándose depresiones. En contraste, los materiales que presentan mayor resistencia han originado relieves estructurales destacables, como el caso de las calizas, en el centro de la cuenca o los conglomerados en los márgenes de esta, formando morfologías abruptas (14).

Respecto a la hidrología del lugar, Zaragoza se encuentra en la mitad del valle Ebro, donde confluye con el río meridional Huerva y el Gállego, este último procedente de los Pirineos. La gran parte de los ríos aragoneses son afluentes del Ebro, pues es el río con mayor caudal de España.

4.1.4. Molestias inducidas por ruido

En el año 2003 fue establecida en el BOE la Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido, en la que se presenta una norma que regula a nivel español la contaminación acústica, para evitar que esta cause perjuicios sobre la salud humana, los bienes o el medio ambiente. En esta, no obstante, no se establecen valores límite de emisión, sino que es indicado que el Gobierno será el encargado de determinarlos.

En el ámbito autonómico, en Aragón se aprobó la Ley 7/2010, de 18 de noviembre, de protección contra la contaminación acústica de Aragón. En ella se clasifican múltiples tipos de áreas acústicas, entre las cuales se encuentran las áreas de usos industriales, estableciendo que estas delimitan sectores del territorio de muy baja sensibilidad acústica y que, por lo tanto, no requieren de una especial protección contra la contaminación acústica, incluyendo zonas con predominio de suelo de uso industrial, así como de usos complementarios al mismo. Del mismo modo, en el Anexo II de dicha ley se establecen los objetivos de calidad acústica para ruido, considerando que son respetados cuando los valores no son superados en ningún momento, y, a su vez, cuando el

97% de todos los valores diarios no superan en 3 dB los valores fijados. Los datos límite para las áreas de usos industriales son plasmados en la Tabla 3.

Tabla 3. Objetivos de calidad acústica para ruido. Fuente: Ley 7/2010 Boletín Oficial de Aragón

Tipo de área acústica	Índices de ruido (dB)		
	Día	Tarde	Noche
Áreas de usos industriales	75	75	65

A continuación, en la Figura 4 se presenta el mapa de ruido de la ciudad de Zaragoza en el período de día-tarde-noche. Este parámetro está representado por un código de colores, desde el más claro simbolizando el menor nivel de ruido hasta el más severo. También se puede observar señalizada en el sur de la fotografía la localización del polígono industrial Empresarium, en la que se corrobora que los límites establecidos no son superados según esta fuente (15).

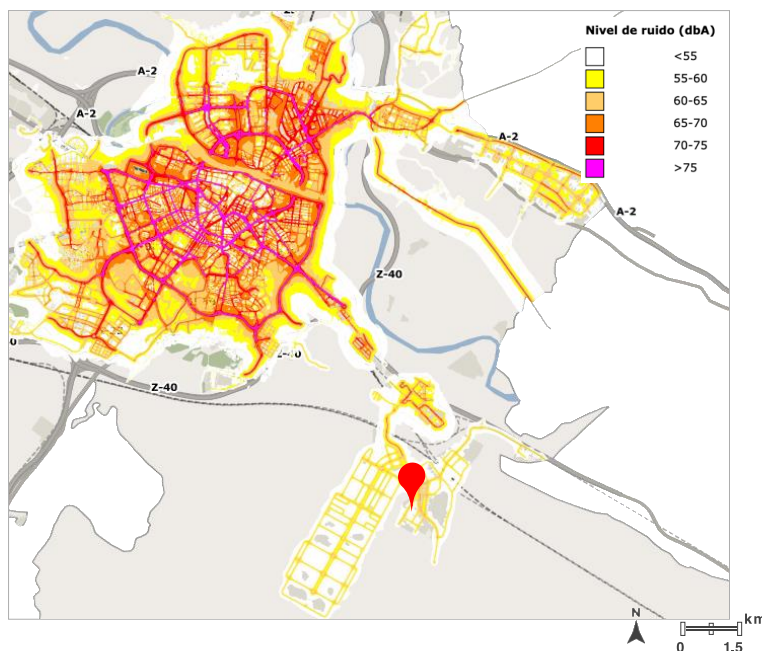


Figura 4. Mapa de ruido de Zaragoza. Fuente: (15)

Como se indicó en apartados anteriores, el ruido generado en la planta estará relacionado con el funcionamiento de maquinarias tales como las bombas y compresores, motores varios, entre otros. Asimismo, el sonido provocado por los vehículos empleados para el transporte de materiales puede llegar a ser significativo. Sin embargo, al encontrarse en un espacio con un bajo nivel de ruido, se determina que no tendrá un impacto importante en los valores de contaminación acústica en la zona, siendo además un área de uso industrial que, por esencia, es poco sensible a este factor.

4.2. Medio biótico

4.2.1. Flora y fauna

Zaragoza se caracteriza por ser árida, con una vegetación espontánea que abarca un área muy extensa (16). La vegetación en la comarca está claramente dividida en varias zonas. En la depresión del Ebro se encuentra un gradiente creciente hacia el centro de plantas xerófilas, típicas de ambientes secos. Las condiciones para el crecimiento y desarrollo de plantas no son precisamente favorables, pues el período en el año en el que esto es posible es realmente corto, lo cual provoca que muchas especies no lleguen a desarrollarse y que las cosechas en los campos sean escasas (17).

La fauna, por su lado, es ciertamente amplia a pesar del clima árido. Entre los mamíferos más comunes se encuentran el conejo, el topillo y el jabalí. Además, entre los reptiles los lagartos y lagartijas son predominantes. También se dan anfibios como los sapos corredores. Por otro lado, no hay una presencia importante de invertebrados, ya que los suelos son muy secos y pobres en materia orgánica. Las aves, por su parte, se encuentran en peligro de extinción en pocos años debido a que han sido apartadas a pequeños refugios arbolados.

En la zona de la ribera del río Ebro, los bosques son caracterizados por ser un ecosistema de transición entre el agua y el suelo seco, por lo que suelen convivir animales de ambos tipos. Los problemas fundamentales de la fauna en Zaragoza son la alta contaminación de las aguas y la elevada densidad humana, lo que ha producido una pérdida grave de diversidad (18).

La planta de producción que se pretende construir no tendría un impacto sobre la flora de la zona, pues esta será instalada en un espacio destinado para infraestructuras industriales. Igualmente, en principio, con respecto a las especies de la fauna local no representaría un peligro, pues los efluentes líquidos del proceso consisten en agua prácticamente limpia, que, de todas formas, previamente a su descarga al medio será sometida a tratamientos de depuración que garanticen el cumplimiento de los límites establecidos.

4.2.2. Red Natura 2000

La Red Natura 2000 está integrada por un conjunto de espacios naturales protegidos de la Unión Europea. Está conformada por ZEPA y por LIC, en otras palabras, por Zonas de Especial Protección para las Aves y por Lugares de Importancia Comunitaria, respectivamente. Son seleccionados aquellos enclaves geográficos donde están localizados los hábitats, especies de aves, fauna y flora silvestre de interés en cada país de la comunidad europea (19).

En las proximidades del polígono donde se decidió ubicar la Planta de PO se encuentra la Reserva Natural de los Sotos y Galachos del Ebro. Este espacio ha sido declarado Lugar de Importancia Comunitaria (LIC) "Galachos de La Alfranca de Pastriz, La Cartuja y El Burgo de Ebro" (LIC

ES2430152) y "Sotos y Mejanas del Ebro" (LIC ES2430081) y además Zona de Especial Protección para las Aves (ZEPA) "Galachos de La Alfranca de Pastriz, La Cartuja y El Burgo de Ebro" (ZEPA ES0000138) (20). Por consiguiente, durante las fases de construcción, operación y desmantelamiento de las instalaciones industriales debe tenerse especial cuidado y control de las emisiones, así como evitar cualquier vertido industrial, respetando en todo momento los límites establecidos por la legislación para minimizar el impacto y proteger la biodiversidad de las proximidades.

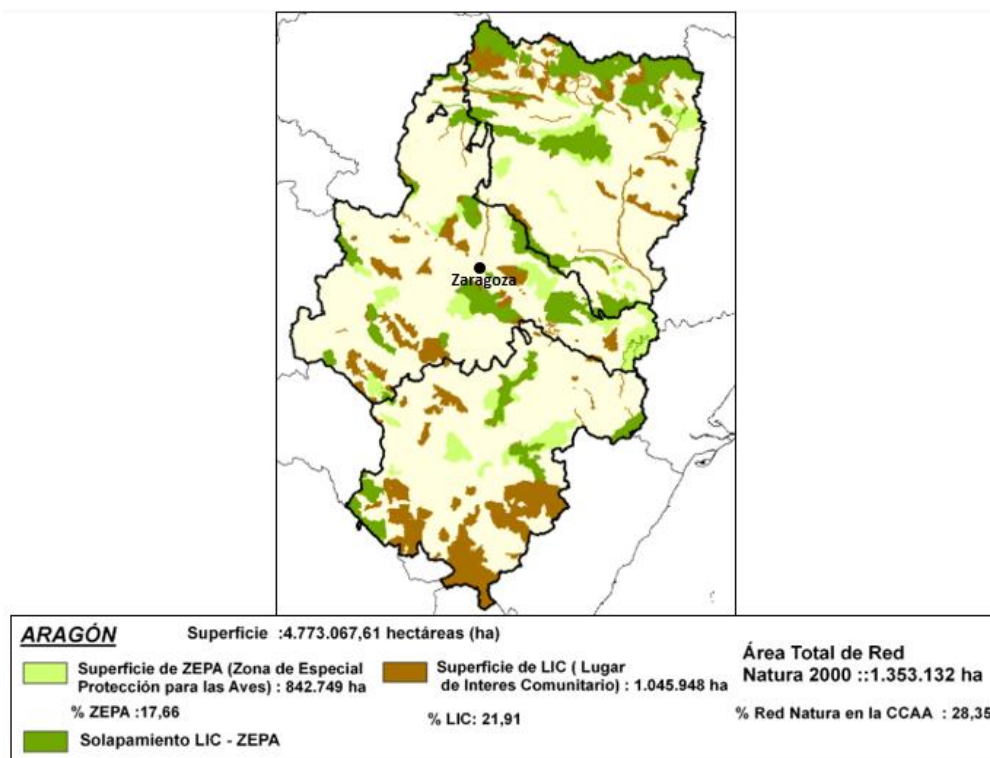


Figura 5. Espacios de la Red Natura 2000 en la comunidad autónoma de Aragón. Fuente: (21)

4.3. Medio socioeconómico y cultural

4.3.1. Población y empleo

El polígono Empresarium donde se ha decidido ubicar la Planta se encuentra en las inmediaciones de la capital aragonesa, es decir, Zaragoza. Cuenta con una densidad poblacional de 730,98 habitantes/km² y una superficie de 967 km².

La información del Padrón Municipal de Habitantes a 1 de enero de 2019 aportó la cifra de 706904 habitantes en dicha ciudad. De esta forma, como se ilustra en la Figura 6, se alcanzó un crecimiento considerable que rompió con la tendencia descendiente de los años anteriores. Asimismo, respecto al envejecimiento de la población, Zaragoza presenta una pirámide típica de las sociedades desarrolladas: en la base existe un estrechamiento debido a la baja natalidad, la

cúspide es ancha por el envejecimiento de la población y el centro se encuentra ensanchado por efecto de la inmigración. Siendo la edad media de la población los 45 años.

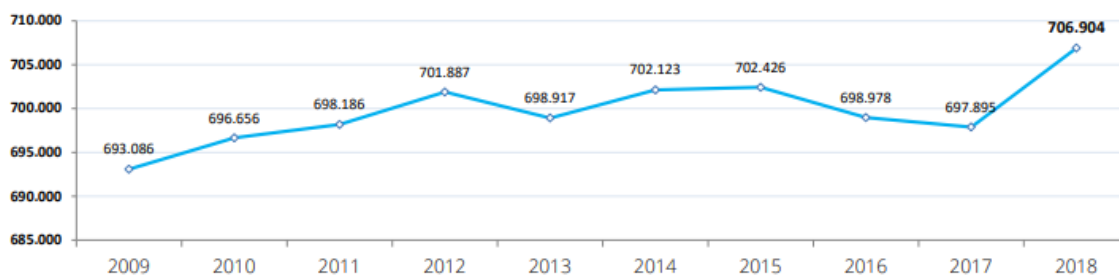


Figura 6. Evolución de la población en Zaragoza. Fuente: (22)

Respecto al ámbito económico, en el año 2017, Aragón fue la comunidad autónoma con mayor crecimiento en España, aumentando su PIB un 3,6% respecto al año anterior. Este crecimiento fue posible gracias al sector primario y la industria, concretamente actividades agroalimentarias y el tirón en la fabricación de automóviles. A día de hoy destaca la factoría de Opel, sucesora de la fábrica de General Motors instalada a finales de los años 1970 en Figueruelas, pueblo próximo a la capital aragonesa. En la Figura 7 se puede observar cómo en Zaragoza y la comunidad de Aragón tiene un importante peso la industria y la agricultura, superando la media del conjunto nacional, la construcción presenta un peso similar y el sector servicios tiene una representación menor.

Sector económico	Datos absolutos. Miles de €			Porcentaje		
	Zaragoza	Aragón	España	Zaragoza	Aragón	España
Agricultura	720.043	1.536.386	27.266.000	3,24	5,16	2,78
Industria	5.775.250	7.329.144	176.484.000	25,98	24,60	18,01
Construcción	1.130.833	1.766.518	54.927.000	5,09	5,93	5,61
Servicios	14.606.245	19.161.774	721.197.000	65,70	64,31	73,60
Total	22.232.371	29.793.822	979.874.000	100,00	100,00	100,00

Figura 7. Datos económicos por ámbito geográfico y sectores económicos. Fuente: (23)

El Instituto Nacional de Estadística registró en el primer trimestre del año 2020, una tasa de paro en la provincia de Zaragoza del 11,06%.

Tras la realización de este análisis, puede concluirse que la instalación de una industria en la ubicación seleccionada traería numerosos beneficios tanto a la población como a la propia fábrica y, por tanto, su impacto sería muy positivo. Por un lado, ayudaría a reducir el desempleo de la región, generando puestos de trabajo tanto de manera directa como indirecta y al mismo tiempo, colaboraría con el rejuvenecimiento de la población. Al mismo tiempo, es de interés la existencia de mano de obra cualificada, por tanto, conociendo que el sector industrial tiene un papel destacado en la economía de la provincia zaragozana, se intuye que existe una formación consolidada en este ámbito.

4.3.2. Uso del suelo

La planta será construida sobre una parcela dentro del polígono Empresarium, en Zaragoza, habilitada para su uso industrial. Por consiguiente, su impacto sobre el entorno es mínimo.

4.3.3. Paisaje y patrimonio

Zaragoza es conocida por el Valle del Ebro, siendo este un factor importante de su estética y atractivo. A pesar de que el polígono Empresarium está localizado cerca del río, este no llega a pertenecer ni a involucrarse en su paisaje. Por lo tanto, se determina que la implantación de la empresa de producción de óxido de propileno no tendrá impacto alguno en el ámbito visual, al estar rodeada de otras construcciones similares en una localización apartada de cualquier elemento de interés cultural de Zaragoza.

4.4. Vulnerabilidad ante accidentes

La Ley 9/2018 de evaluación ambiental introdujo modificaciones en el Artículo 35 original presentado en la Ley 21/2013 obligando al promotor a incluir en el estudio de impacto ambiental un análisis sobre la vulnerabilidad de los proyectos ante accidentes graves o catástrofes (24). Que se produzcan accidentes en una planta se encuentra estrechamente vinculado a la seguridad de esta, por consiguiente, se trata de un aspecto clave a analizar.

La seguridad en toda planta química es un factor que deberá ser garantizado de manera meticulosa mediante la aplicación de las medidas correspondientes indicadas en la legislación vigente. De esta manera, se pretende prevenir que tenga lugar cualquier escenario que ponga en riesgo la seguridad de la instalación, de sus operarios y del medioambiente. No obstante, ningún proceso es completamente previsible, por lo que se han de llevar a cabo estudios que permitan determinar los peligros asociados a la instalación y la gravedad en caso de ocurrir algún accidente.

Para el caso de la Planta HPPO fue realizado un análisis elemental del riesgo empleando el índice DOW. Como resultado se obtuvo que el único reactor existente en el proceso presenta una peligrosidad grave y, en caso de incendio o explosión, el radio de exposición sería de 40 metros. A esa distancia no se espera ningún impacto en el medio biótico ni en las aguas del entorno, pues el área de exposición se encuentra en las zonas habilitadas del polígono. Sin embargo, cabe destacar que en la calidad del aire sí se produciría un detrimento temporal a causa de la liberación de partículas a la atmósfera. Asimismo, las instalaciones y naves vecinas también son susceptibles a sufrir daños. Respecto a posibles catástrofes naturales, no se tiene constancia de riesgo alguno en la zona.

Por último, ha de ser mencionado que se trabaja con sustancias peligrosas las cuales deben cumplir lo dispuesto en Real Decreto 840/2015, de 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan

sustancias peligrosas. Asimismo, deben seguirse los criterios mínimos establecidos en el Real Decreto 1196/2003, de 19 de septiembre, para la prevención y control de los riesgos de accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas.

5. IDENTIFICACIÓN Y VALORACIÓN DE IMPACTOS AMBIENTALES

A continuación, se procede a identificar y justificar las diferentes actividades generadas por la construcción, la operación y el desmantelamiento de la planta que, de manera directa o indirecta, producirán efectos sobre los factores medioambientales descritos en el apartado anterior. Para valorar el impacto provocado debe recalcar que este no solo depende de la actividad realizada sino también de la susceptibilidad del medio.

Como ya fue mencionado en el inventario ambiental, por tratarse de una zona habilitada para el uso industrial, en cualquiera de las tres fases de la planta (construcción, operación y desmantelamiento) el impacto sobre el clima, el paisaje, la flora y la fauna y la geología, podrá considerarse mínimo. Además, los BREF donde se establecen las Mejores Técnicas Disponibles destacan que el proceso HPPO conlleva una elevada reducción de las aguas residuales generadas comparado con las otras alternativas y destaca por la ausencia de coproductos.

Respecto a las demás alteraciones en el medio físico, puesto que la tecnología empleada posee una huella ecológica considerablemente menor a las demás alternativas para la producción de óxido de propileno, aunque la calidad del aire se vea ligeramente afectada por las emisiones procedentes de la generación de utilidades o de la combustión en antorcha durante la fase de operación, este será un impacto ínfimo. Asimismo, durante la fase de construcción y desmantelamiento es posible que sí exista cierto empeoramiento en la calidad del aire por el trasiego continuo de vehículos de grandes dimensiones y posible formación de nubes de polvo y alteración del terreno. Sin embargo, puesto que estas fases son de carácter temporal su impacto no es persistente. En lo relativo a la hidrología, no se prevé que esta se vea afectada durante la fase constructiva ni en la de desmantelamiento. No obstante, durante la operación de la planta pueden existir vertidos accidentales de sustancias tóxicas, lo que conllevaría a la contaminación del suelo, pudiendo llegar hasta la capa freática y produciendo un importante impacto negativo. Además, respecto al ruido, este será constante en las tres fases de la planta, pues durante la operación será generado por el empleo de maquinaria como bombas y compresores, mientras que en las fases inicial y final también será producido por las obras y el transporte de materiales de construcción.

En lo relativo a aspectos poblacionales y económicos, las tres fases de la planta generarán empleos tanto de forma directa como indirecta (empresas subcontratadas). Como consecuencia, se reducirá

la tasa de paro, habrá un enriquecimiento de la economía de la zona y se generará un crecimiento demográfico por la migración de personas al entorno zaragozano.

5.1. Matriz de Leopold

Con el fin de establecer un sistema que permita el análisis de los diversos impactos consecuencia de la construcción, explotación y desmantelamiento de la Planta de PO se hará uso de la Matriz de Leopold. El método de la Matriz de Leopold consiste en tres elementos básicos: una lista de los efectos en el medioambiente que el desarrollo propuesto pueda inducir, una evaluación de la importancia de cada uno de los efectos listados y una evaluación a modo resumen, que combina las estimaciones de magnitud e importancia (25).

En este sistema las columnas representan las actividades que tienen lugar durante la realización del proyecto mientras que en las filas se presentan los factores ambientales considerados. Su intersección es numerada con dos valores: la primera columna, M, es indicativa de la magnitud y toma valores comprendidos en el intervalo $[-5,5]$, correspondiéndose los números negativos a aquellos impactos perjudiciales. La segunda columna, I, hace referencia a la importancia del impacto de la actividad analizada respecto a cada uno de los factores ambientales que son considerados y se le asignan valores enteros en el rango $[1,5]$, cuanto más alto sea el número, mayor será la importancia.

En la Figura 8 se presenta la Matriz de Leopold realizada a la Planta de HPPO. En la última columna es calculado el impacto total del proyecto, donde se obtiene un valor correspondiente al balance global de todos los impactos teniendo en cuenta su magnitud e importancia. El valor obtenido se corresponde 98. Por consiguiente, se concluye que el impacto de la totalidad del proyecto es positivo, pues los impactos negativos producidos principalmente a los medios físicos y biológicos se ven superados por los positivos, relacionados en su mayoría con aspectos socioeconómicos.

MATRIZ DE LEOPOLD SIMPLIFICADA PARA EVALUACIÓN DE IMPACTOS DE LA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÓXIDO DE PROPILENO A PARTIR DE PERÓXIDO DE HIDRÓGENO

ACCIONES DEL PROYECTO			FASE DE CONSTRUCCIÓN								FASE DE EXPLOTACIÓN								FASE DE DESMANTELAMIENTO						Nº INDICADORES POSITIVOS	Nº INDICADORES NEGATIVOS	IMPACTO POR SUBCOMPONENTE	IMPACTO POR COMPONENTES	IMPACTO TOTAL DEL PROYECTO		
			Acondicionamiento del terreno		Cimentación y estructuras		Instalaciones de obra		Tránsitos de vehículos pesados		Operación normal de la planta		Operación anómala de la planta		Tratamiento de aguas residuales		Tránsito de vehículos		Mantenimiento		Trabajos de demolición		Generación y desecho de residuos de obra							Tránsito de vehículos pesados	
FACTORES AMBIENTALES			M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I					
Criterios de Valoración			M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I					
FÍSICO	SUELO	Tasa de erosión	-2	1	-1	1	-1	1	-3	2							-3	2			-2	3	-1	1	-3	2	0	8	-29	-227	98
		Estructuras	-2	1	-2	1	-1	1	-2	2			-2	1			-2	2			-3	4	-2	1	-2	2	0	9	-33		
	ATMÓSFERA	Calidad del aire	-2	2	-1	1	-1	1	-3	3	-3	2	-3	2			-3	3	-1	1	-3	2	-3	2	-3	3	0	11	-58		
		Ruido	-3	2	-2	2	-2	2	-3	3	-3	2	-3	2	-2	2	-3	3	-1	1	-4	1	-1	1	-3	3	0	12	-63		
	AGUA	Turbidez	-2	1	-1	1	-1	1	-2	2			-2	1	4	3	-2	2	-1	1	-2	1	-3	2	-2	2	1	10	-15		
		Toxicidad							-1	1	-2	1	-2	1	3	3	-1	1					-4	2	-1	1	1	6	-6		
	PAISAJE	Calidad	-2	1	-1	2	-2	2	-2	1	-2	1	-3	1	2	2	-2	1			1	1	-3	3	-2	1	2	9	-23		
BIOLÓGICO	FLORA	Estructura y composición	-3	2	-1	1	-1	2	-2	1			-2	1	3	2	-2	1			-2	2	-3	2	-2	1	1	9	-21	-65	
		Habitat	-2	3	-1	2	-1	2	-1	1			-2	1	3	3	-1	1			-2	1	-2	2	-1	1	1	9	-12		
	FAUNA	Habitat	-2	3	-2	3	-2	1	-3	2			-2	1	2	3	-3	2			-2	1	-2	1	-3	2	1	9	-32		
SOCIO ECONÓMICO	POBLACIÓN	Migración	3	4	4	3	2	4	4	2	4	3			3	4	4	2	4	3	2	3	3	2	4	2	11	0	104	390	98
	TERRITORIO	Uso de la Tierra	4	4	1	1	2	1			2	2			2	3			2	2	2	2	-3	2			7	1	31		
	ECONOMÍA	Generación de Empleo	5	5	5	5	4	5	4	5	5	5	3	5	5	5	4	5	5	5	3	5	5	4	4	5	12	0	255		
INDICADORES con MAGNITUD POSITIVA			3		3		3		2		3		1		9		2		3		4		2		2		37				
INDICADORES con MAGNITUD NEGATIVA			9		9		9		10		4		9		1		10		3		8		11		10		93				
SUMA DE PRODUCTOS (M x I)			17		18		12		-16		25		-12		85		-16		38		-12		-25		-16				98		

Figura 8. Matriz de Leopold. Fuente: elaboración propia

6. MEDIDAS PARA LA MITIGACIÓN DE LOS IMPACTOS

Es necesario establecer medidas que permitan prevenir, corregir, compensar y, en caso de ser posible, eliminar los efectos ambientales ocasionados por la planta de óxido de propileno. Así, en este apartado serán descritas posibles acciones que pueden ser adoptadas con el fin de minimizar los efectos adversos sobre el medio.

6.1. Medidas en la fase de construcción

Los vehículos empleados para el transporte de los materiales de obra necesarios en la construcción de la planta deben contar con certificados que acrediten haber realizado las revisiones técnicas pertinentes y que no superen las emisiones contaminantes permitidas. Además, deberán circular exclusivamente por los viales en que estén autorizados.

Asimismo, el horario en que se lleven a cabo las tareas de construcción tendrá que estar restringido a aquellas horas en que el ruido producido por las obras ocasione las menores molestias posibles a los habitantes de los alrededores y, en todo momento, cumpliendo con la legislación vigente en materia de contaminación acústica. Del mismo modo, deberán ser empleados aquellos equipos que produzcan una menor emisión de ruido y disminuyan la propagación de las vibraciones.

La construcción de las estructuras necesarias será llevada a cabo conforme con la legislación vigente, con materiales convenientes que permitan la disminución del levantamiento de partículas sólidas hacia la atmósfera y de la generación de residuos. De la misma forma, Los residuos generados en esta fase serán clasificados e identificados según el material para su desecho adecuado. Además, en el caso de residuos especiales, tóxicos o peligrosos se contactará con una empresa especialista para que estos sean retirados y correctamente manipulados (26).

6.2. Medidas en la fase de operación

A lo largo de la vida útil de la planta se deberán aplicar múltiples medidas de prevención y disminución de impactos sobre el ambiente que permitan operar de la manera óptima posible, pues, al ser la fase más prolongada, será la de mayor influencia.

Durante esta fase deberán adoptarse acciones similares a las comentadas en la fase de construcción respecto a la mejora de la calidad atmosférica. Además, se ha de realizar un control continuo de las emisiones gaseosas y un mantenimiento correcto de los equipos. Sin embargo, cabe destacarse que las emisiones en este proceso son mínimas, lo cual lo hace una alternativa verde para la producción de óxido de propileno. En relación con el ruido deberán desarrollarse programas de mejoras acústicas, donde se opte por el empleo de aquellos equipos más silenciosos, así como llevar a cabo un mantenimiento adecuado de la maquinaria y un control periódico de los niveles, tanto dentro de la instalación como en sus alrededores y, si resulta necesario, instalar apantallamientos y crear puestos protegidos (27).

En cuanto a las medidas relacionadas con el impacto sobre el agua, toda el agua residual generada en la empresa ya sea procedente del proceso o el agua sanitaria, será sometida a un proceso de depuración, con la finalidad de cumplir con los límites de descarga fijados por la legislación vigente. Asimismo, este recurso será reutilizado en cuanto sea posible. Se destinará un área para los residuos líquidos, tales como aceites y vertidos, con el fin de no mezclarlos con el resto de los efluentes, evitando así su contaminación innecesaria.

Como medidas mitigatorias para disminuir los impactos negativos que la planta ocasiona sobre la fauna que se encuentra próxima al entorno de las instalaciones, se propone la disminución de la contaminación lumínica, minimizar los ruidos producidos y evitar vertidos que puedan dañar el agua de la zona. Respecto a la flora, las actividades que desencadenen el levantamiento de nubes de polvo deberán reducirse. Además, será considerada la posibilidad de repoblar un espacio natural con especies autóctonas para la creación de un bosque, y así compensar la huella de carbono.

En lo que concierne al aspecto socioeconómico, se procurará mantener en todo momento un canal de información entre la compañía y la comunidad, con el objetivo de mantener una relación de transparencia y confianza. Igualmente, se optará por dar oportunidades a la mano de obra local para así impulsar el desarrollo económico de la zona y mejorar la percepción social acerca de la industria. Por otro lado, se promoverán proyectos en colaboración con las universidades, ofreciendo programas de prácticas en empresa a estudiantes y proyectos de investigación para el desarrollo de nuevos conceptos y tecnologías más sostenibles.

6.3. Medidas en la fase de desmantelamiento

Respecto al tránsito de vehículos pesados, ruido y contaminación atmosférica deberán adoptarse medidas similares a las que han sido mencionadas en la fase de construcción.

Esta fase estará caracterizada por la alta generación de residuos sólidos, por lo que serán el principal factor hacia el que se orientarán las medidas de mitigación y prevención. Los residuos sólidos serán clasificados según el material, así como de acuerdo con si se pueden reutilizar, reciclar o si deberán ser desechados habiendo llegado al final de su vida útil. Los escombros, por su lado, podrán ser utilizados como rellenos de otras construcciones. Asimismo, los trabajos de demolición deberán ser llevados a cabo en el horario que ocasionen menores molestias a la población del entorno y acortar, en lo máximo que sea posible, su duración en el tiempo.

7. PROGRAMA DE VIGILANCIA AMBIENTAL

El Programa de Vigilancia Ambiental (PVA) es de vital importancia para asegurar que las medidas preventivas, correctivas y compensatorias más idóneas estén siendo cumplidas. Se

recomienda que el PVA sea llevado a cabo por una entidad independiente a las partes implicadas, con el fin de asegurar su adecuada puesta en marcha.

Durante la fase de obra deberán detectarse y corregir las desviaciones con relevancia ambiental, respecto a lo establecido en el proyecto de construcción, se deberá supervisar la correcta aplicación de medidas ambientales y habrá que determinar la necesidad de suprimir, o bien modificar o introducir otras medidas. Será necesario seguir la evolución de los elementos ambientales esenciales, así como realizar futuros estudios de impacto ambiental. Se seguirán las medidas establecidas en el apartado anterior.

En el seguimiento ambiental en fase de explotación, deberá justificarse la prolongación de la extensión temporal de esta fase, considerando en todo momento la relevancia que presentan en el medio los efectos adversos previstos. Asimismo, tendrá que verificarse la correcta evolución de las medidas mitigatorias implantadas y realizarse un seguimiento de la evolución ambiental en los alrededores de la instalación.

En el PVA es necesario conocer la eficacia de las medidas correctoras propuestas en el apartado anterior y al mismo tiempo identificar nuevos impactos, controlar y cuantificar los parámetros ambientales. Para ello, como mínimo, deben considerarse los siguientes aspectos: objetivos del control establecido, lugar de inspección, periodicidad, necesidades de material, parámetros sometidos al control, umbrales críticos y sus medidas compensatorias en caso de alcanzarse (26). En las próximas líneas es detallado el contenido de las diferentes actuaciones para el control de la calidad del aire (Tabla 4), el agua (Tabla 5) y el ruido (Tabla 6).

Tabla 4. Actuación para la vigilancia de la calidad del aire

CONTROL DE LA CALIDAD DEL AIRE	
Objetivos del control	Comprobar la influencia que tienen las emisiones gaseosas sobre la atmósfera y actuar en consecuencia.
Lugar de Inspección	En la instalación y sus alrededores.
Periodicidad	Las mediciones serán diarias.
Material necesario y método de trabajo	Medidores de emisiones de gases, revisiones periódicas del funcionamiento de la maquinaria.
Parámetros sometidos a control	Concentración de los gases contaminantes indicados en el Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire.
Umbrales críticos	Valores límites de emisión recogidos en el Anexo I del Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire.
Medidas en caso de alcanzar umbrales	En casos de superar los umbrales críticos se considerará un reajuste de la unidad, sustituyendo la maquinaria empleada por otra menos contaminante.

Tabla 5. Actuación para la vigilancia de la calidad de las aguas

CONTROL DE CALIDAD DE LAS AGUAS	
Objetivos del control	Asegurar la calidad del agua del entorno durante las diferentes fases de la planta.
Lugar de Inspección	En la instalación y en el río Ebro
Periodicidad	Inspecciones visuales semanales, mensuales para mediciones in situ y trimestral para las tomas de muestra analizadas en laboratorio.
Material necesario, método de trabajo y necesidades de personal técnico	Será necesario personal de la planta para las inspecciones visuales y la recogida de muestras. Un laboratorio acreditado será el encargado de analizar las muestras.
Parámetros sometidos a control	Turbidez, pH, conductividad, temperatura, caudal, DQO, DBO, metales pesados, sólidos de suspensión, aniones, cationes y demás que se consideren relevantes.
Umbrales críticos	Aquellos que superen los definidos en la normativa vigente. Para la calidad de aguas superficiales en puntos de vertido se utilizan los valores establecidos en el Real Decreto Legislativo 1/2001, de 20 de julio, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley de Aguas.
Medidas en caso de alcanzar umbrales	Estudiar el origen de la fuente de contaminación y buscar medidas protectoras.

Tabla 6. Actuación para la vigilancia de la contaminación acústica

CONTROL DE LA CONTAMINACIÓN ACÚSTICA	
Objetivos del control	Comprobar la influencia que tienen las emisiones gaseosas sobre la atmósfera y actuar en consecuencia.
Lugar de Inspección	En la instalación y sus alrededores.
Periodicidad	Las mediciones serán periódicas, siendo realizadas tanto en período diurno como nocturno.
Material necesario y método de trabajo	Empleo de sonómetros.
Parámetros sometidos a control	Nivel sonoro.
Umbrales críticos	Valores límites de ruido para áreas de uso industrial recogidos en la Ley 7/2018, de 18 de noviembre, de protección contra la contaminación acústica de Aragón (75 dB de día y 65 dB nocturno).
Medidas en caso de alcanzar umbrales	En casos de superar los umbrales críticos se considerará el reemplazo de la maquinaria más ruidosa y el empleo de pantallas acústicas.

8. RESUMEN Y CONCLUSIONES

En el presente Estudio de Impacto Ambiental han sido identificados, descritos y evaluados los posibles impactos que puede ocasionar la construcción, operación y desmantelamiento de la Planta de producción de PO, ubicada en el polígono industrial Empresarium, en Zaragoza. Siguiendo la legislación vigente, se procedió a la descripción general del proyecto, así como a la justificación de la tecnología empleada atendiendo a las mejores técnicas disponibles para la manufactura del óxido de propileno.

Además, fueron analizados los posibles efectos significativos sobre distintos factores físicos, bióticos y socioeconómicos. También se incluyó un apartado específico para la Red Natura 2000 pues, aunque la instalación no se encuentre dentro de estos espacio protegidos, existe uno en las proximidades. Asimismo, fueron propuestas diversas medidas protectoras con el fin de minimizar los impactos y fue descrito el plan de vigilancia ambiental.

A partir de la información anterior, fue elaborada la Matriz de Leopold. Con ella se determinó que las actividades involucradas en la construcción y en el desmantelamiento de la planta son aquellas con mayor impacto negativo sobre el ambiente. No obstante, estas solo se llevan a cabo de forma temporal, por lo que el perjuicio al medio no es prolongado en el tiempo y son compensadas por los beneficios socioeconómicos que se traerían a la zona. En definitiva, el impacto global de la planta de producción en cuestión es positivo.

Por todo esto, el proyecto es considerado como viable. No obstante, deberán ser aplicadas en todo momento las acciones recogidas en Programa de Vigilancia Ambiental con el fin de reducir y eliminar en la medida en que sea posible los impactos negativos en el entorno de las instalaciones.

9. BIBLIOGRAFÍA

1. **EPA.** U.S. Environmental Protection Agency. *Greenhouse Gas Inventory Guidance: Indirect Emissions from Purchased Electricity*. [En línea] enero de 2016. [Citado el: 27 de mayo de 2020.] Disponible en: https://www.epa.gov/sites/production/files/2016-03/documents/electricityemissions_3_2016.pdf.
2. **ZARAGOZA TURISMO.** *Cómo llegar*. [En línea] [Citado el: 25 de febrero de 2020.] Disponible en: <http://www.zaragoza.es/ciudad/turismo/es/organiza-viaje/como-llegar/como-llegar.htm>.
3. **NIJHUIS, T. Alexander et al.** The Production of Propene Oxide: Catalytic Processes and Recent Developments. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2006, 45, págs. 3447-3459.
4. **KAWABATA, Tomonori y Jun YAMAMOTO.** *Trends and Views in the Development of Technologies for Propylene Oxide Production*. 2019. Vol. 2019.
5. **ICIS.** *Propylene Oxide (PO) Production and Manufacturing Process*. [En línea] 12 de noviembre de 2011. [Citado el: 18 de febrero de 2020.] Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/06/9076451/propylene-oxide-po-production-and-manufacturing-process/>.
6. **NEXANT. CHEM SYSTEMS.** *PERP Program. Hydrogen Peroxide-Based Propylene Oxide: New Report Alert*. [En línea] febrero de 2008. [Citado el: 19 de febrero de 2020.]
7. **THYSSENKRUPP Industrial Solutions AG.** *Propylene Oxide: The Evonik-uhde HPPO technology: Innovative, Profitable, Clean*. [En línea] [Citado el: 18 de febrero de 2020.] Disponible en: https://d13qmi8c46i38w.cloudfront.net/media/UCPthyssenkruppBAIS/assets.files/products___services/chemical_plants___processes/organic_chemicals___petrochemicals/2018-06-06_propylene-oxide-broschuere_zf.pdf.
8. **SCHMIDT, Franz et al.** *HPPO Process Technology: A novel route to propylene oxide without coproducts*. [En línea] marzo de 2014. [Citado el: 21 de febrero de 2020.]
9. **AEMET.** *Valores climatológicos normales. Zaragoza Aeropuerto*. [En línea] 2020. [Citado el: 20 de mayo de 2020.] Disponible en: <http://www.aemet.es/es/serviciosclimaticos/datosclimatologicos/valoresclimatologicos?l=9434&k=arn>.
10. **AYUNTAMIENTO DE ZARAGOZA.** *Plan General de Ordenación Urbana de Zaragoza: Clima*. [En línea] 1999. [Citado el: 28 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://www.zaragoza.es/contenidos/urbanismo/pgouz/memoria/memoinfo/territo/medio/clima.pdf>.
11. **GOBIERNO DE ARAGÓN. DEPARTAMENTO DE AGRICULTURA, GANADERÍA Y MEDIO AMBIENTE.** *Índice diario de calidad del aire*. [En línea] [Citado el: 26 de mayo de 2020.] Disponible en: http://www.aragonaire.es/assets/documents/IDCA_GobAragon.pdf.

12. **THE WORLD AIR QUALITY PROJECT.** *Contaminación del aire de Las Fuentes, Zaragoza.* [En línea] 27 de mayo de 2018. [Citado el: 28 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://aqicn.org/city/spain/zaragoza/las-fuentes/es/>.
13. **NATURALEZA DE ARAGÓN.** *El relieve Aragonés. Descripción del Territorio.* [En línea] [Citado el: 28 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://www.naturalezadearagon.com/geologia/pgrelieve.php>.
14. **PEÑA MONNÉ, José Luis.** *Mapa geomorfológico de Aragón.* Zaragoza : Series Investigación: Publicaciones del Consejo de Protección de la Naturaleza de Aragón, 2002. ISBN: 84-89862-27-3.
15. **AYUNTAMIENTO DE ZARAGOZA.** *Ruido en viales urbanos.* [En línea] 2016. [Citado el: 28 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://www.zaragoza.es/sede/portal/idezar/mapa/ruido/#>.
16. **AYUNTAMIENTO DE ZARAGOZA.** *Plan General de Ordenación Urbana de Zaragoza: Vegetación.* [En línea] mayo de 1999. [Citado el: 27 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://www.zaragoza.es/contenidos/urbanismo/pgouz/memoria/memoinfo/territo/medio/vegeta.pdf>.
17. **PORTALFARMA.** *Clima y Vegetación.* [En línea] [Citado el: 26 de mayo de 2020.] Disponible en: <http://cofzaragoza.portalfarma.com/aerobi/clima.htm>.
18. **AYUNTAMIENTO DE ZARAGOZA.** *Plan General de Ordenación Urbana de Zaragoza: Fauna.* [En línea] mayo de 1999. [Citado el: 27 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://www.zaragoza.es/contenidos/urbanismo/pgouz/memoria/memoinfo/territo/medio/fauna.pdf>.
19. **GOBIERNO DE ARAGÓN.** *Red Natura 2000.* [En línea] Dirección General de Medio Natural y Gestión Forestal. Disponible en: <https://www.aragon.es/-/red-natura-2000>.
20. **GOBIERNO DE ARAGÓN.** *Reserva Natural Dirigida de los Sotos y Galachos del Ebro.* [En línea] Departamento de Agricultura, Ganadería y Medio Ambiente. [Citado el: 28 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://www.aragon.es/-/reserva-natural-dirigida-de-los-sotos-y-galachos-del-ebro>.
21. **SEO BIRD LIFE.** *La gestión de 48 espacios de la Red Natura 2000 de Aragón en participación pública.* [En línea] [Citado el: 27 de mayo de 2020.] Disponible en: <https://www.seo.org/2015/02/06/la-gestion-de-48-espacios-de-la-red-natura-2000-de-aragon-en-participacion-publica/>.
22. **ZARAGOZA AYUNTAMIENTO.** *Cifras de Zaragoza: datos demográficos del padrón municipal de habitantes.* [En línea] 2019. [Citado el: 28 de mayo de 2020.] Disponible en: <http://www.zaragoza.es/contenidos/estadistica/Cifras-ZGZ-2019.pdf>.
23. **SERVICIO PÚBLICO DE EMPLEO ESTATAL .** *Informe del Mercado de Trabajo de Zaragoza.* [En línea] 2018. [Citado el: 28 de mayo de 2020.] Disponible en: https://www.sepe.es/contenidos/observatorio/mercado_trabajo/3065-1.pdf.

24. **VIVES RIERA, Nico.** *Ley 9/2018 de Evaluación Ambiental: Principales cambios sobre la Ley 21/2013.* [En línea] [Citado el: 4 de junio de 2020.] Disponible en: Ley 9/2018 de Evaluación Ambiental: Principales cambios sobre la Ley 21/2013.

25. **JOSIMOVIC, Bosko, Jasna PETRIC y Sasa MILJIC.** *The Use of the Leopold Matrix in Carrying Out the EIA for Wind.* Belgrado : Energy and Environment Research; Vol. 4, nº 1; 2014. ISSN: 1927-0569.

26. **GEOALCALI.** *Estudio de impacto ambiental refundido: proyecto de explotación mina "Muga" (Navarra y Aragón).* [En línea] [Citado el: 31 de mayo de 2020.] Disponible en: https://www.navarra.es/NR/rdonlyres/3E914E09-4F40-48CE-87CB-4F98D23D0501/390738/Estudiodeimpactoambiental_parteIII.pdf.

27. **HIDALGO OTAMENDI, Antonio; Alberto MARTIN HERNÁNDEZ y Miguel Ángel LÓPEZ MORCILLO.** *Ruido ambiental. Estrategias de mejora.* [En línea] Centro de Estudio y Control de Ruido (CECOR), 22 de octubre del 2008. [Citado el: 27 de mayo de 2020.] Disponible en: <http://www.sea-acustica.es/fileadmin/Coimbra08/id279.pdf>.

DOCUMENTO IV

Pliego de condiciones¹

¹ El Pliego de condiciones se presenta en el Archivo II de este proyecto.

DOCUMENTO V

Presupuesto

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN 2

2. COSTE DE LOS EQUIPOS 2

3. ACTUALIZACIÓN DE LOS COSTES..... 3

4. COSTE TOTAL DE CAPITAL..... 4

5. DESGLOSE DE LAS PARTIDAS 6

6. PRESUPUESTO TOTAL 8

7. BIBLIOGRAFÍA..... 9

1. INTRODUCCIÓN

La finalidad del presupuesto es la determinación del coste económico, en unidades monetarias, de la ejecución material del proyecto. La mayor parte de los proyectos de diseño de ingeniería química son llevados a cabo con la finalidad de proporcionar la información necesaria para que puedan ser realizadas las estimaciones correspondientes a los costes de operación y capital (1).

La precisión de la estimación depende de los detalles existentes correspondientes al diseño, la exactitud de los datos sobre costes disponibles y el tiempo empleado en la preparación de dichas estimaciones. En las etapas iniciales del proyecto, por la cantidad de información disponible, solo será requerida y justificada una estimación aproximada. La estimación del coste para el presente proyecto puede clasificarse dentro de la Clase IV, pues presenta un carácter preliminar dado que se basa en detalles de diseño y datos sobre costes limitados, situándose su precisión entorno al +/- 30% y englobándose dentro del área de la ingeniería conceptual.

El presupuesto se divide en múltiples partes, entre las que destacan la inversión en capital fijo y el capital circulante. Para la determinación de las distintas partidas del presupuesto será empleado el método factorial de estimación de costes, basado en una evaluación del precio de compra de las principales piezas de equipamiento del proceso, deduciendo a partir de este el resto de los costes mediante un cálculo factorial.

2. COSTE DE LOS EQUIPOS

En la bibliografía (1) se facilita un método estimativo para conocer de forma preliminar el coste de los equipos mediante correlaciones de la forma mostrada en la Ecuación 1, donde C_e es el coste de compra del equipo, a , b y n son las constantes referidas a cada tipo de equipo y S es el parámetro de diseño utilizado como base para el cálculo.

$$C_e = a + b S^n \quad \text{Ecuación 1}$$

Este procedimiento es aplicado para cada uno de los equipos del proceso empleando los parámetros determinados en el *Anexo* de este documento, así como en el *Documento I*. Se comprobó que estos se encuentran comprendidos dentro de los límites de aplicación de S , a excepción de dos de ellos, las calderas E-302 y E-310, en las que se sobrepasa el límite superior, mas al tratarse de valores próximos a este, se asume aceptable. Además, los precios fueron calculados en dólares americanos y son convertidos a euros conociendo que el cambio de divisa a 15 de junio de 2020 es de 1 US \$ = 0,88 € (2). Los resultados se presentan en la Tabla 1.

Del mismo modo, se hace necesario adaptar los costes al material de construcción, pues, estos valores son empleados directamente en equipos de acero al carbono, mientras que los de esta instalación serán de acero inoxidable 304. Para esto, la referencia utilizada (1) indica que se ha de multiplicar el valor obtenido del coste por un factor de 1,3.

Tabla 1. Parámetros y cálculo de coste de compra de equipos. Fuente: (1)

	S inf	S sup	a	b	n	Equipo	S	C _e , €
Bombas centrífugas S: Caudal en L/s	0,2	126	6900	206	0,9	P-101	90,15	16.491,22
						P-201	49,65	12.163,25
						P-305	29,61	9897,05
Compresores S: Potencia en kW	93	16800	220000	2300	0,75	C-201	886,70	522.485,51
						C-301	287,70	334.987,36
Tanque flash vertical (SS 304) S: Masa en kg	160	250000	10000	29	0,85	V-201	24639,71	146.765,66
						V-202	9286,26	68.992,94
Intercambiadores y y condensadores S: Área en m ²	10	1000	24000	46	1,2	E-101	70,58	27.813,64
						E-201	691,34	124.603,34
						E-301	102,35	31.576,03
						E-303	523,81	95.293,73
						E-305	411,37	76.623,49
						E-307	40,66	24.573,74
						E-308	171,15	40.497,46
						E-309	1036,38	189.333,90
Kettle reboilers (calderas) S: Área en m ²	10	500	25000	340	0,9	E-302	586,69	114.795,37
						E-304	21,54	26.740,33
						E-306	167,85	52.087,56
						E-310	606,66	117.633,38
Columnas verticales SS 304 S: Masa en kg	160	250000	10000	29	0,85	T-301	13641,26	92.265,50
						T-302	7829,67	60.867,01
						T-303	10053,62	73.195,41
						T-304	31664,14	179.551,00
Platos de las columnas S: Diámetro de columna en m	0,5	5	110	380	1,8	T-301	3,30	59.297,61
						T-302	3,01	40.435,93
						T-303	2,25	61.449,76
						T-304	4,8	148.894,14
Reactor S: Volumen en m ³	0,5	100	53000	28000	0,8	R-101	9,25	192.707,67

3. ACTUALIZACIÓN DE LOS COSTES

Los precios determinados previamente están basados en datos históricos, por lo que se encuentran referidos al año 2007. Al encontrarse sujetos a una inflación a lo largo del tiempo estos han de ser actualizados para conocer el valor que tendrán en el año en curso. Para ello se hace uso de un método comúnmente empleado que utiliza índices de costes publicados por alguna institución. Estos predicen costes actuales al relacionarlos con los de años previos, con base en datos medios reales de los distintos componentes que afectan los costes de una industria. Uno de los índices más famosos es el desarrollado por la revista *Chemical Engineering* en Estados Unidos, el *Chemical Engineering Plant Cost Index*, abreviado CEPCI y usualmente conocido como el índice

CE. El procedimiento de cálculo para la actualización de los costes se detalla en la Ecuación 2, donde conocidos los costes del año B, en este caso, del 2007, y su índice CE, con un valor de 509,7, así como el índice del año al que se destinará la actualización, es posible estimar el coste que la partida tendría en el año A (1).

$$\text{Coste en año A} = \text{Coste en año B} \cdot \frac{\text{Índice de costes año A}}{\text{Índice de costes año B}} \quad \text{Ecuación 2}$$

Los costes de compra de la maquinaria calculados serán actualizados al 2019, pues se trata del año con el índice medio anual más reciente al momento de la elaboración de este presupuesto (3). A continuación, en la Tabla 2 se presentan los índices empleados para la actualización llevada a cabo y el resultado obtenido a través de este método.

Tabla 2. Actualización de los costes de compra de los equipos

Parámetro	Valor
Índice CE 2007	509,7
Coste de equipos 2007	3.824.624,67 €
Índice CE 2019	607,5
Coste de equipos actualizado a 2019	4.558.484,38 €

4. COSTE TOTAL DE CAPITAL

El coste total de capital es la totalidad de la inversión necesaria para la planta y se calcula como la suma de los costes fijos más el capital circulante. La inversión de capital total fijo es el coste total del diseño, construcción e instalación de la planta y sus modificaciones asociadas necesarias para la preparación del sitio. Este se encuentra compuesto de las siguientes partidas:

- I. La inversión dentro de los límites de batería del proceso (denominado ISBL, por sus siglas en inglés), es decir, el coste de la planta en sí mismo.
- II. Las modificaciones y mejoras que deben ser realizadas en las infraestructuras, denominadas inversiones *offsite* u OSBL (fuera de los límites de batería).
- III. Costes de ingeniería y diseño.
- IV. Fondo por contingencias.
- V. Compra de la parcela.

Puesto que se optó por el empleo del método factorial, para el cálculo del coste ISBL deben aplicarse los factores correspondientes a las distintas partidas y que se encuentran resumidos en la Tabla 3.

Tabla 3. Factores para el cálculo de la inversión dentro del límite de batería del proceso. Fuente: (1)

Partida	Factor	Valor
Coste actualizado de equipos	C_e	1
Instalación del equipo	f_{er}	0,3
Tuberías	f_p	0,8
Instrumentación y control	f_i	0,3
Electricidad	f_{el}	0,2
Obra civil	f_c	0,3
Estructuras y edificios	f_s	0,2
Revestimientos y pintura	f_l	0,1

El coste de capital del ISBL (C_{ISBL}) puede ser determinado empleando la expresión de la Ecuación 3, siendo i cada uno de los equipos presentes en la instalación, $C_{e,i,CS}$ el coste individual de los equipos que fue estimado sobre acero al carbono y a los que se les debe aplicar, junto con las tuberías, el correspondiente factor de material (f_m).

$$C_{ISBL} = \sum_{i=1}^{i=M} C_{e,i,CS} [(1 + f_p) f_m + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l)] \quad \text{Ecuación 3}$$

Conocido el C_{ISBL} , es posible determinar a partir de su valor los costes asociados al *offsite*, el diseño y la ingeniería y las contingencias. Los factores empleados para cada una de estas partidas se presentan en la Tabla 4.

Tabla 4. Otros factores para el cálculo de la inversión. Fuente: (1)

Partida	Factor	Valor
<i>Offsites</i>	OS	0,3
Diseño e Ingeniería	D&I	0,3
Contingencias	X	0,1

Así, aplicando la expresión descrita por la Ecuación 4, donde se suman los costes asociados al ISBL, OSBL, diseño e ingeniería, contingencias, así como el coste asociado a la compra de la parcela a partir de los datos proporcionados en el apartado 7.5. *Características del polígono seleccionado*, de la *Memoria*, se obtiene la inversión de capital fijo (C_{FC}), conocido también como capital inmovilizado.

$$C_{FC} = C_{ISBL}(1 + OS)(1 + D\&E + X) + \text{Compra parcela} \quad \text{Ecuación 4}$$

Por último, para determinar el coste total de la inversión debe calcularse el capital circulante, es decir, el dinero necesario adicionalmente al coste de construcción de la planta, para su puesta en marcha y mantenimiento hasta que comience a dar beneficios. El capital circulante se estima como un 15% de los costes ISBL+OSBL.

5. DESGLOSE DE LAS PARTIDAS

En primer lugar, se determinarán las partidas incluidas dentro de los costes directos, donde se incluyen los ítems asociados a los costes dentro del límite de batería (ISBL) así como los costes *offsite*. Para ellos se emplearán los factores proporcionados en el apartado anterior.

Tabla 5. Partidas dentro de los costes directos

No. Partida	Partida	Resumen	Cantidad	Cuantía (€)
1	ISBL	Inversión dentro del límite de batería	Partidaalzada	13.114.408,90
1.1	Coste total de los equipos	Adquisición, transporte y entrega de los principales equipos	Partidaalzada	4.558.484,38
1.2	Instalación de los equipos	Erección, cimentación y trabajos estructurales menores	Partidaalzada	1.051.957,93
1.3	Tuberías	Instalación, aislamiento, pintura y accesorios de tuberías	Partidaalzada	3.646.787,50
1.4	Instrumentación y control	Instrumentos y sistemas para el control automático del proceso	Partidaalzada	1.051.957,93
1.5	Electricidad	Compra de cableado, iluminación e instalación	Partidaalzada	701.305,29
1.6	Obra civil	Carreteras, cimentación, desagües, muros...	Partidaalzada	1.051.957,93
1.7	Estructuras y edificios	Edificios auxiliares, oficinas, laboratorios, talleres...	Partidaalzada	701.305,29
1.8	Revestimiento, aislante y pintura	Instalación y compra de material aislante, trabajos de pintura	Partidaalzada	350.652,64
2	Costes <i>offsite</i> o fuera del límite de batería	Utilidades, subestaciones eléctricas, torres de enfriamiento, servicios de emergencia, edificios auxiliares...	Partidaalzada	3.934.322,67

A continuación, en la Tabla 6, se procede al desglose de las partidas englobadas dentro de los costes indirectos.

Tabla 6. Partidas dentro de los costes indirectos

No. Partida	Partida	Resumen	Cantidad	Cuantía (€)
3	Diseño e Ingeniería	Diseño detallado y servicios de ingeniería requeridos para llevar a cabo el proyecto	Partidaalzada	5.114.619,47
4	Contingencias	Costes extra por posibles variaciones del presupuesto por errores o imprevistos	Partidaalzada	1.704.873,16

Es necesario, asimismo, determinar la partida correspondiente a la compra de la parcela donde se ubica la planta de HPPO. Esta se muestra en la Tabla 7.

Tabla 7. Partidas de la compra del terreno

No. Partida	Partida	Resumen	Cantidad	Cuantía (€)
5	Compra de la parcela	Solar de ubicado en el Polígono Industrial Empresarium, Zaragoza con un precio de 100 €/m ²	27511 m ²	2.751.100,00

Llegado este punto, se conocen todas las partidas que integran el capital fijo de la planta, o lo que es lo mismo, el capital inmovilizado. Su coste se recoge en la Tabla 8.

Tabla 8. Coste total del capital fijo

Capital fijo	Resumen	Cuantía (€)
	Capital inmovilizado	26.619.324,19

Por último, en la Tabla 9 se presenta la partida del capital circulante.

Tabla 9. Partida del capital circulante

No. Partida	Partida	Resumen	Cantidad	Cuantía (€)
6	Capital circulante	Materias primas y costes de transporte para la puesta en marcha, inventarios, dinero para créditos, tasas e impuestos	Partida alzada	2.557.309,73

6. PRESUPUESTO TOTAL

La inversión total en la planta se estima como la suma de todas las partidas desglosadas anteriormente y que se recogen a modo resumen en la Tabla 10.

Tabla 10. Desglose del presupuesto

Partida	Cuantía (€)
Coste total de los equipos	4.558.484,38
Instalación equipos	1.051.957,93
Tuberías	3.646.787,50
Instrumentación y control	1.051.957,93
Electricidad	701.305,29
Obra civil	1.051.957,93
Estructuras y edificios	701.305,29
Revestimiento, aislante y pintura	350.652,64
<i>Offsite</i>	3.934.322,67
Diseño e Ingeniería	5.114.619,47
Contingencias	1.704.873,16
Compra de la parcela	2.751.100,00
Capital circulante	2.557.309,73
TOTAL	29.176.633,93

El presupuesto total para la planta de producción de óxido de propileno a partir de peróxido de hidrógeno es de VEINTINUEVE MILLONES CIENTO SETENTA Y SEIS MIL SEISCIENTOS TREINTA Y TRES EUROS CON NOVENTA Y TRES CÉNTIMOS (29.176.633,93 €).

En Santiago de Compostela, a 16 de junio de 2020

Las autoras del proyecto,



Ángeles Antonieta Rodríguez Oreiro



Sabela Teixeira Taboada

7. BIBLIOGRAFÍA

1. **SINNOTT, Ray y Gavin TOWLER.** *Chemical Engineering Design*. Oxford: Butterworth-Heinemann, Elsevier, 2009. ISBN: 978-0-7506-8551-1.
2. **INFOBOLSA.** *Conversor de divisas*. [En línea] 15 de junio de 2020. [Citado el: 15 de junio de 2020.] Disponible en: <https://www.infobolsa.es/divisas/conversor>.
3. **CHEMICAL ENGINEERING.** *2019 Chemical Engineering Plant Cost Index Annual Average*. [En línea] Marzo de 2020. [Citado el: 12 de junio de 2020.] Disponible en: <https://www.chemengonline.com/2019-chemical-engineering-plant-cost-index-annual-average/>.

ANEXO

Dimensionamiento básico de
otros equipos

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	2
2. TANQUES FLASH.....	2
3. COMPRESORES	4
4. INTERCAMBIADORES DE CALOR	5
5. COLUMNAS DE DESTILACIÓN.....	7
6. BIBLIOGRAFÍA.....	8

1. INTRODUCCIÓN

Con el objetivo de realizar el presupuesto para el proyecto de la planta de producción de óxido de propileno, es necesario realizar cálculos aproximados referentes a los equipos que se encuentran en las instalaciones. En el *Anexo II: Cálculos Justificativos* fue realizado el diseño riguroso del reactor catalítico R-101 y la columna de destilación metanol/agua T-304, incluyendo su dimensionamiento. No obstante, para los equipos restantes se procede a efectuar los cálculos básicos a partir de los cuales se obtendrán los valores aproximados de los distintos parámetros requeridos para la estimación de su coste total de compra.

2. TANQUES FLASH

La disposición y proporciones típicas de los separadores verticales líquido-gas se muestran en la Figura 1.

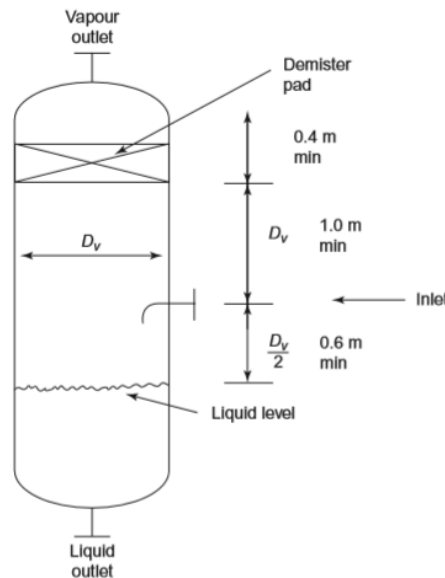


Figura 1. Separador vertical líquido-vapor. Fuente: (1)

En la Ecuación 1 se sitúa la expresión empleada para estimar la velocidad a la que se depositan las gotas de líquido, siendo u_t dicha velocidad (m/s) y ρ_l y ρ_v las densidades del líquido y vapor, respectivamente (kg/m^3).

$$u_t = 0,07 \cdot \left(\frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_l} \right)^{1/2} \quad \text{Ecuación 1}$$

El diámetro del recipiente debe ser lo suficientemente grande para ralentizar el gas por debajo de la velocidad a la que las gotas se depositarán. Por consiguiente, el mínimo diámetro permisible que asegura tal condición se define según la Ecuación 2.

$$D_v = 0,07 \cdot \left(\frac{4 \cdot V_v}{\pi \cdot u_s} \right)^{1/2} \quad \text{Ecuación 2}$$

Siendo D_v el diámetro mínimo del recipiente, V_v el caudal volumétrico del vapor o gas y $u_s = 0,15 u_t$, en caso de no utilizar una malla deshumidificadora, o bien $u_s = u_t$ de optar por su uso.

Atendiendo a la bibliografía (1) se asume un tiempo de residencia (t_r) de 10 minutos. Conocido este valor, y multiplicándolo por el caudal volumétrico de líquido (L_v), se obtiene el volumen de líquido contenido en el interior del recipiente (V_l). De esta manera, despejando la Ecuación 3, se determina el nivel de líquido (N_l) en el recipiente.

$$V_l = \pi \cdot \frac{D_v^2}{4} \cdot N_l \quad \text{Ecuación 3}$$

Por último, considerando las proporciones presentadas en la Figura 1, se determina la altura del tanque empleando la Ecuación 4.

$$L = 2 \cdot D_v + N_l \quad \text{Ecuación 4}$$

Los parámetros utilizados y los valores obtenidos hasta este punto para los dos tanques flash de la planta (V-201 y V-202), se muestran en la Tabla 1. Cabe destacar que las densidades fueron obtenidas haciendo uso del simulador *Aspen HYSYS* y que se optó por el empleo de una malla deshumidificadora en ambos equipos.

Tabla 1. Dimensionamiento de los separadores V-201 y V-202

Parámetro	Valor	
	V-201	V-202
$\rho_l, \text{kg/m}^3$	721	520
$\rho_v, \text{kg/m}^3$	11,19	10
$u_t, \text{m/s}$	0,56	0,50
$u_s, \text{m/s}$	0,084	0,075
$V_v, \text{m}^3/\text{s}$	1,33	0,17
D_v, m	4,50	2,07
t_r, s	600	600
$L_v, \text{m}^3/\text{s}$	0,06	0,05
V_l, m^3	36,76	30,08
N_l, m	2,31	8,92
L, m	11,31	13,06
L/D	2,5	6,3

Conocidos el diámetro y la longitud de cada uno de los recipientes es posible realizar parte de su diseño mecánico con el fin de conocer los espesores. Para ello, se calculará el espesor requerido para la tensión radial y longitudinal, y se seleccionará el mayor valor obtenido. Además, se considerará un factor de corrección por corrosión de 2 mm, debido a que se asume que la corrosión no es severa. En el cálculo del espesor para tensión radial se emplea la Ecuación 5.

$$t_{radial} = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 1,2 \cdot P_i} + 0,002 \quad \text{Ecuación 5}$$

En el cálculo del espesor para esfuerzo longitudinal se emplea la Ecuación 6.

$$t_{longitudinal} = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E - 0,8 \cdot P_i} + 0,002 \quad \text{Ecuación 6}$$

Donde P_i es la presión de diseño, D_i es el diámetro interno, S es el máximo esfuerzo permisible del material de construcción empleado (se opta por acero inoxidable de tipo AISI 304), E es la eficacia de unión de soldadura y t es el espesor mínimo requerido. Antes de realizar dichos cálculos, debe determinarse la presión de diseño. Así, siguiendo el código ASME BPV Sec.VIII Div. I, se establece que el margen de diseño para la presión puede ser un 10% superior o bien 25 psi (1,72 bar) adicionales a la presión de operación manométrica máxima. Se selecciona como presión de diseño el mayor valor obtenido haciendo uso de la Ecuación 7 y la Ecuación 8.

$$P_d(psi) = 25 + P_{op,g} \quad \text{Ecuación 7}$$

$$P_d = 1,1 \cdot P_{op,g} \quad \text{Ecuación 8}$$

Tras determinar la presión de diseño y posterior selección del espesor apropiado, se procede al cálculo del volumen del material que ocupa el recipiente ($V_{material}$) y, conocida la densidad del acero inoxidable, se determina finalmente la masa, pues se trata del parámetro necesario para la estimación del coste de este tipo de equipos. Los parámetros empleados en dichos cálculos y valores obtenidos se presentan en la Tabla 2.

Tabla 2. Determinación de la masa de los separadores V-201 y V-202

Parámetro	Valor	
	V-201	V-202
$P_{op,g}, bar$	5	8,1
P_d, bar	6,71	9,81
S, bar	1034,2	1034,2
E	0,85	0,85
t_{radial}, mm	19,17	13,56
$t_{longitudinal}, mm$	10,59	7,78
D_v, m	4,50	2,07
L, m	11,31	13,06
$\rho_{acero\ inoxidable}, kg/m^3$	8000	8000
$V_{material}, m^3$	3,08	1,16
Masa carcasa, ton	24,64	9,29

3. COMPRESORES

Para este tipo de equipos el parámetro de diseño requerido para el cálculo de costes es la potencia de trabajo. El modo de operación de los compresores industriales depende del diseño y modo de operación de la máquina. Para compresores reciprocantes se suele considerar trabajo isentrópico

en el que $n = \gamma$, tal y como se empleó en el *Anexo I* de la memoria: *Balances de materia y energía*. El aporte de trabajo necesario viene dado por la Ecuación 9 (1).

$$W = \frac{\gamma R T_{entrada}}{\gamma - 1} \cdot \left(\left(\frac{P_{salida}}{P_{entrada}} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} - 1 \right) \quad \text{Ecuación 9}$$

Donde W hace referencia al trabajo en kJ/kmol, γ es la relación de capacidades caloríficas, R la constante universal de los gases ideales en kJ/kmol K, $T_{entrada}$ es la temperatura de entrada (K), $P_{entrada}$ y P_{salida} las presiones de entrada y salida del equipo, respectivamente.

Finalmente, la potencia teórica de los compresores se determina multiplicando el trabajo aportado por el caudal molar total que será comprimido (kmol/s) y este valor es dividido entre la eficiencia del equipo (η) para conocer la potencia total necesaria, este último parámetro se considera de un 80% para los compresores en cuestión. Los datos empleados para el cálculo y los resultados para cada compresor de la planta son presentados en la Tabla 3.

Tabla 3. Cálculo de la potencia requerida para los compresores

Parámetro	Valor	
	C-201	C-301
γ	1,22	1,23
$T_{entrada}, K$	290,79	263,36
P_{salida}, bar	9,2	6
$P_{entrada}, bar$	6	4,3
$W, kJ/kmol$	1074,58	752,64
η	0,80	0,80
$m, kmol/s$	0,66	0,31
Potencia, kW	886,71	287,70

4. INTERCAMBIADORES DE CALOR

El coste de los intercambiadores de calor dependerá del tipo de equipo que es seleccionado, así como del área de transmisión necesaria. Con el fin de determinarla habrá que seguir el procedimiento explicado en las próximas líneas.

El calor intercambiado entre fluidos fue calculado cuando se llevaron a cabo los balances de energía. A partir de este valor (Q), mediante la ecuación general para la transmisión de calor a través de una superficie (Ecuación 10), se puede determinar el área de intercambio (A).

$$Q = U A \Delta T_m \quad \text{Ecuación 10}$$

Donde Q es el calor transferido por unidad de tiempo (W), U el coeficiente global de transmisión de calor (W/m² °C) y ΔT_m la diferencia de temperatura media, es decir, la fuerza impulsora (°C). El valor del coeficiente U será estimado para cada uno de los equipos empleando valores típicos recomendados en la bibliografía (1) para los pares de fluidos presentes en el intercambiador.

Por otro lado, la diferencia de temperatura ΔT_m debe ser estimada de acuerdo con el tipo de intercambio que será llevado a cabo, diferenciando si se producen cambios de fase o no. Para cambios de calor sensible en contracorriente se suele emplear la diferencia de temperatura media logarítmica ΔT_{lm} , calculada de acuerdo con la Ecuación 11.

$$\Delta T_{lm} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \left(\frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1} \right)} \quad \text{Ecuación 11}$$

Donde T_1 y T_2 son las temperaturas de entrada y salida del fluido caliente, respectivamente y, del mismo modo, t_1 y t_2 las del fluido frío. En los intercambiadores de carcasa y tubos el flujo no circula siguiendo una contracorriente estricta, sino como un conjunto de diversos patrones. Es por esto por lo que será necesario aplicar un factor de corrección al valor calculado, quedando $\Delta T_m = F_t \Delta T_{lm}$. Este factor se puede determinar a partir de la Figura 2 y dependerá de las temperaturas de los fluidos y del número de pases, así como de dos números adimensionales, R y S, mostrados a continuación.

$$R = \frac{(T_1 - T_2)}{(t_2 - t_1)} \quad ; \quad S = \frac{(t_2 - t_1)}{(T_1 - t_1)}$$

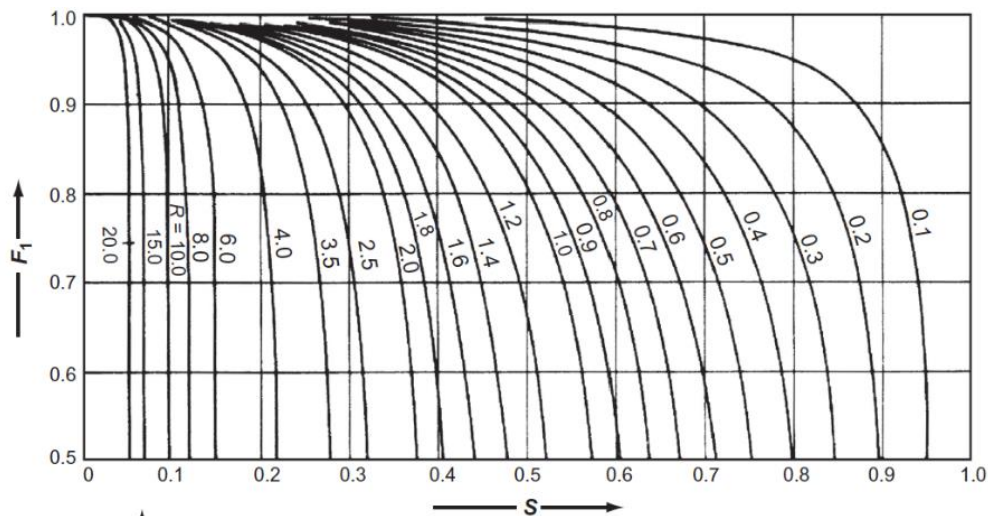


Figura 2. Factor de corrección de temperatura. Fuente: (1)

Por su parte, los intercambiadores en los que se produce la condensación de un vapor saturado puro tendrán la característica de que $T_1 = T_2 = T_{\text{saturación}}$. Además, cuando se trabaja con un vapor a una temperatura superior a la de saturación, cuyo sobrecalentamiento no resulta excesivo (calor sensible inferior a un 25% del calor latente) es posible asumir que el coeficiente U es equivalente al de condensación pura, por lo que, como una aproximación adecuada, se pueden realizar los cálculos asumiendo que solo se produce la condensación, y, por ende, determinar la diferencia de temperatura media con base en la temperatura de saturación. En este caso, no será necesario un factor de corrección de la diferencia de temperatura logarítmica (1). Los valores obtenidos se recogen en la Tabla 4.

Tabla 4. Cálculo del área de transferencia en intercambiadores de calor

Equipo	Q, kW	$U, W/m^2\ ^\circ C$	$\Delta T_m, ^\circ C$	A, m^2
E-101	5869,14	600	138,59	70,58
E-201	10514,54	700	21,73	691,34
E-301	4097,93	900	44,48	102,35
E-302	3637,49	1000	179,9	586,69
E-303	11531,61	1000	22,02	523,81
E-304	1602,34	900	82,67	21,54
E-305	11878,12	900	32,08	411,31
E-306	11813,17	900	78,2	167,85
E-307	1107,48	600	45,39	40,66
E-308	5138,20	600	50,04	171,15
E-309	48450,23	1000	46,75	1036,38
E-310	48714,44	1000	80,3	606,66

5. COLUMNAS DE DESTILACIÓN

A la hora de determinar el coste de las columnas de destilación debe conocerse la masa del correspondiente recipiente a presión, así como el diámetro de los platos empleados y su tipología. Puesto que la columna T-304 ha sido diseñada de manera rigurosa, en las próximas líneas se realizará un dimensionamiento aproximado de las torres de destilación T-301, T-302 y T-303. Para ello se hace uso del programa *Aspen HYSYS*, donde se efectúa la simulación de cada una de las columnas en las condiciones de operación deseadas, obteniendo su diámetro y el número de platos. Asimismo, asumiendo un espaciado entre platos de 0,6 m se obtiene la altura del equipo. Se asume, además, que los platos de las tres columnas son de tipo perforado. Los valores obtenidos se recogen en la Tabla 5.

Tabla 5. Cálculo de la potencia requerida para los compresores

Parámetro	Valor		
	T-301	T-302	T-303
Nº de platos	20	16	40
Espaciado entre platos, m	0,6	0,6	0,6
Diámetro, m	3,3	3,01	2,25
Altura, m	12	9,6	24

Conocidos el diámetro y la altura del recipiente, es necesario determinar el espesor de la carcasa para así obtener el volumen ocupado por el material y posteriormente hallar su masa, parámetro que permitirá la estimación de su coste. El procedimiento seguido para la obtención de los valores pertinentes es análogo al empleado para los tanques flash en el apartado 2. *TANQUES FLASH* del presente Anexo. En la Tabla 6 se muestran los resultados obtenidos. Como material de construcción se selecciona acero inoxidable AISI 304.

Tabla 6. Determinación de la masa de las carcassas de las columnas T-301, T-302 y T-303

Parámetro	Valor		
	T-301	T-302	T-303
$P_{op,g}, bar$	4,5	3,4	2,5
P_d, bar	6,21	5,11	4,21
S, bar	1034,2	1034,2	1034,2
E	0,85	0,85	0,85
t_{radial}, mm	13,65	10,74	7,38
$t_{longitudinal}, mm$	7,83	6,37	4,69
Diámetro, m	3,3	3,01	2,25
Altura, m	12	9,6	24
$\rho_{acero\ inoxidable}, kg/m^3$	8000	8000	8000
$V_{material}, m^3$	1,71	0,98	1,26
Masa carcasa, ton	13,64	7,83	10,05

6. BIBLIOGRAFÍA

1. SINNOTT, Ray y Gavin TOWLER. *Chemical Engineering Design*. Oxford : Butterworth-Heinemann, Elsevier, 2009. ISBN: 978-0-7506-8551-1.
2. WALAS, Stainley M. *Chemical Process Equipment. Selection and Design*. Massachusetts : Butterworths Series in Chemical Engineering, 1990. ISBN: 0-7506-9385-1.